

# 5. Formale Grundlagen der Quantenmechanik

# Ortsraum & Impulsraum

Ortsraum  $\mathbf{H}_R$ : Raum aller differenzierbaren Funktionen  $\psi(r): \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$  mit  $\int d^3r |\psi(r)|^2 < \infty$

Es ist manchmal nützlich, noch allgemeinere Funktionen zuzulassen

**Der Ortsraum als Vektorraum:**  $(\phi + \psi)(r) = \phi(r) + \psi(r)$  Funktionen werden punktweise addiert  
 $(\lambda \phi)(r) = \lambda \phi(r)$

**Erinnerung:**

Ein Vektorraum  $\mathbf{V}$  ist eine Menge in der eine Addition und eine skalare Multiplikation definiert sind.  
Für  $\phi, \psi \in \mathbf{V}, \lambda \in \mathbb{C}$ :  $\phi + \psi, \lambda \phi \in \mathbf{V}$  mit Rechenregeln so wie für reelle Zahlen

$\mathbf{H}_R$  ist ein Vektorraum mit Skalarprodukt:  $\langle \psi | \phi \rangle \equiv \int d^3r \psi^*(r) \phi(r)$   
und somit ein **Hilbert-Raum**

**Erinnerung:**

Ein Skalarprodukt ist eine Abbildung  $\langle | \rangle : \mathbf{V} \times \mathbf{V} \rightarrow \mathbb{C}$  mit den Eigenschaften:

$$\alpha, \beta \in \mathbf{V}, \lambda \in \mathbb{C} \Rightarrow \langle \phi | \alpha + \lambda \beta \rangle = \langle \phi | \alpha \rangle + \lambda \langle \phi | \beta \rangle, \quad \langle \alpha | \beta \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^*$$

$$\alpha \neq 0 \Rightarrow \langle \alpha | \alpha \rangle > 0$$

## Exkurs: Allgemeine Hilbert-Räume

Wellenfunktionen enthalten die volle Information über ein physikalisches System. Man bezeichnet normierte Elemente  $\psi(r) \in \mathbf{H}_R$ ,  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$  auch als “quantenmechanische Zustände” bzw. kurz als “Zustände”.

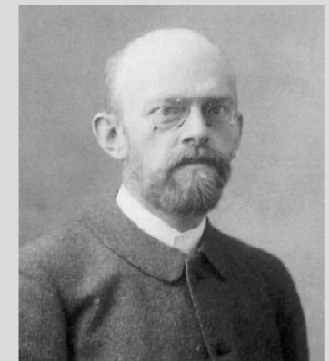
Komplexwertige skalare Wellenfunktionen sind nicht immer ausreichend, um die Zustände eines physikalischen Systems zu charakterisieren. Der quantenmechanische Zustandsraum besitzt aber im Allgemeinen die Struktur eines Hilbertraums. Deshalb ist es sinnvoll, allgemeine Hilberträume  $\mathbf{H}$  zu betrachten.

Ein Hilbertraum  $\mathbf{H}$  ist ein Vektorraum mit Skalarprodukt:  $\langle | \rangle : \mathbf{H} \times \mathbf{H} \rightarrow \mathbb{C}$

$$\alpha, \beta \in \mathbf{H}, \lambda \in \mathbb{C} \Rightarrow \langle \phi | \alpha + \lambda \beta \rangle = \langle \phi | \alpha \rangle + \lambda \langle \phi | \beta \rangle, \quad \langle \alpha | \beta \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^*$$

$$\alpha \neq 0 \Rightarrow \langle \alpha | \alpha \rangle > 0$$

Zwei Zustände  $\phi, \psi \in \mathbf{H}$  heißen orthogonal, falls  $\langle \psi | \phi \rangle = 0$



David Hilbert  
(1862 – 1943)



Fourier-Transformation, Übergang zur Variable  $p = \hbar k$ :  $\psi(r) \longleftrightarrow \hat{\psi}(p) = \hbar^{-3/2} \text{FT}[\psi](p/\hbar)$

$$\psi(r) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \hat{\psi}(p) e^{i\frac{p}{\hbar} r} \longleftrightarrow \hat{\psi}(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r \psi(r) e^{-i\frac{p}{\hbar} r} = \hbar^{-3/2} \text{FT}[\psi](p/\hbar)$$

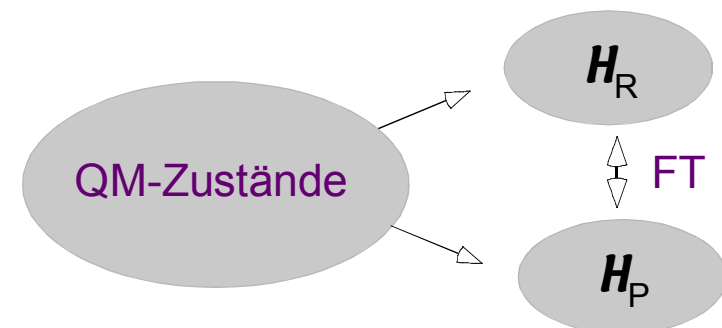
Impulsraum  $H_P$ : Raum aller Impulsraumwellenfunktionen  $\hat{\psi}(p): \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$

$H_P$  ist ebenfalls ein Hilbert-Raum

mit Skalarprodukt:  $\langle \hat{\psi}(p) | \hat{\phi}(p) \rangle = \int d^3p \hat{\psi}^*(p) \hat{\phi}(p)$

Die Fourier-Transformation ist ein Hilbertraum-Isomorphismus zwischen den Räumen  $H_R$  und  $H_P$ , i.e., eine bijektive lineare Abbildung, die das Skalarprodukt erhält

Parseval-Gleichung  $\rightarrow \langle \psi(r) | \phi(r) \rangle = \langle \hat{\psi}(p) | \hat{\phi}(p) \rangle$



## Operatoren im Orts und Impulsraum:

Neben der Addition bzw. skalaren Multiplikation von Wellenfunktionen sind zur Beschreibung physikalischer Vorgänge weiterer Operationen im Ortsraum bzw. Impulsraum nötig, z. B. die Differentiation

$$\nabla: \mathbf{H}_R \rightarrow \mathbf{H}_R, \phi(r) \rightarrow \nabla\phi(r)$$

oder die Multiplikation mit einer Funktion  $f(r)$

$$M_f: \mathbf{H}_R \rightarrow \mathbf{H}_R, \phi(r) \rightarrow f(r) \phi(r)$$

Erwartungswerte physikalischer Größen “ $q$ ” haben in  $\mathbf{H}_R$  die allgemeine Form

$$\langle q \rangle_\psi = \int d^3r \psi^*(r) Q\psi(r) = \langle \psi | Q\psi \rangle \quad \text{mit } Q: \mathbf{H}_R \rightarrow \mathbf{H}_R, \phi(r) \rightarrow Q\phi(r)$$

Die für die Quantentheorie relevanten Operationen  $Q$  haben die Eigenschaft der Linearität:

$$\begin{aligned} \text{Für } \phi, \psi \in \mathbf{H}_R, \lambda \in \mathbb{C} : \quad & Q[\phi + \psi] = Q[\phi] + Q[\psi] \\ & Q[\lambda\phi] = \lambda Q[\phi] \end{aligned}$$

Dies führt zum Begriff des Operators . . .

## Operatoren:

Eine lineare Abbildung  $A: \mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H}$ ,  $\phi \rightarrow A \phi$  heißt Operator

Linearität:  $A (\lambda \phi + \psi) = \lambda A \phi + A \psi \quad \forall \phi, \psi \in \mathbf{H}, \lambda \in \mathbb{C}$

Skalare Multiplikation:  $(\lambda A) \phi \equiv \lambda A \phi$   
Addition von Operatoren:  $(A + B) \phi \equiv A \phi + B \phi$   
Produkte von Operatoren:  $(A * B) \phi \equiv A (B \phi)$

Funktionen von Operatoren:  $A: \mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H}$ ,  $F: \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$  analytische Funktion,  $F(q) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} F_n q^n$   
 $F(A): \mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H}$ ,  $F(A) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} F_n A^n$

Kommutator von zwei Operatoren:  $[A, B] \phi \equiv A(B\phi) - B(A\phi)$

Mit Operatoren kann man wie mit komplexen Zahlen rechnen, mit einer Ausnahme:

Operatoren kommutieren i. A. nicht:  $[A, B] \neq 0$ , diese Eigenschaft unterscheidet sie von gewöhnlichen komplexen Zahlen und spielt eine zentrale Rolle in der Quantentheorie.

**BSP:**  $R: \mathbf{H}_R \rightarrow \mathbf{H}_R, \phi(r) \rightarrow R\phi(r) \equiv r \phi(r)$   $R = \text{Ortsoperator}$

$P: \mathbf{H}_R \rightarrow \mathbf{H}_R, \phi(r) \rightarrow P\phi(r) \equiv -i\hbar \nabla \phi(r)$   $P = \text{Impulsoperator}$

Kommutator:  $[R_\nu, P_\mu] = i\hbar \delta_{\nu\mu}$

$$\begin{aligned} ([R_\nu, P_\mu]\phi)(r) &= (R_\nu(P_\mu\phi))(r) - (P_\mu(R_\nu\phi))(r) = -i\hbar r_\nu \partial_\mu \phi(r) + i\hbar \partial_\mu (r_\nu \phi(r)) \\ &= -i\hbar \cancel{r_\nu} \partial_\mu \phi(r) + i\hbar \delta_{\nu\mu} \phi(r) + i\hbar \cancel{r_\nu} \partial_\mu \phi(r) = i\hbar \delta_{\nu\mu} \phi(r) \end{aligned}$$

# Adjungierte und selbstadjungierte Operatoren

Zwei Operatoren  $A, B$  heißen adjungiert, falls gilt:  $\forall \phi, \psi \in \mathbf{H} : \langle \psi | A \phi \rangle = \langle B \psi | \phi \rangle$

In diesem Fall nennt man  $B$  den zu  $A$  adjungierten Operator und bezeichnet ihn mit  $A^+$ .

Für das Beispiel Ortsraum  $\mathbf{H}_R$ :

$$\int d^3r \psi^*(r) A \phi(r) = \int d^3r [A^+ \psi(r)]^* \phi(r)$$

Beispiel:  $A = \nabla \Rightarrow A^+ = -\nabla$  (folgt mit partieller Integration)

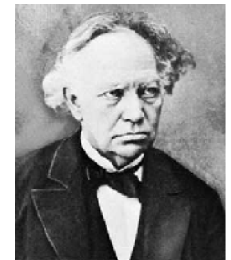
**Rechenregeln:**  $(A + \lambda B)^+ = A^+ + \lambda^* B^+ \quad (A B)^+ = B^+ A^+ \quad (A^+)^+ = A$

$$\langle \psi | (A + \lambda B) \phi \rangle = \langle \psi | A \phi \rangle + \lambda \langle \psi | B \phi \rangle = \langle A^+ \psi | \phi \rangle + \lambda \langle B^+ \psi | \phi \rangle = \langle A^+ \psi | \phi \rangle + \langle \lambda^* B^+ \psi | \phi \rangle = \langle (A^+ + \lambda^* B^+) \psi | \phi \rangle$$

$$\langle \psi | A B \phi \rangle = \langle A^+ \psi | B \phi \rangle = \langle B^+ A^+ \psi | \phi \rangle$$

$$\langle (A^+)^+ \psi | \phi \rangle = \langle \psi | A^+ \phi \rangle = \langle A^+ \phi | \psi \rangle^* = \langle \phi | A \psi \rangle^* = \langle A \psi | \phi \rangle$$

Operatoren mit  $A = A^+$  heißen selbstadjungiert (oder hermitesch).



Charles Hermite  
(1822 – 1901)



**BSP:**  $R\phi(r) \equiv r \phi(r)$ ,  $P\phi(r) \equiv -i\hbar \nabla \phi(r)$  sind selbstadjungierte Operatoren auf  $\mathcal{H}_R$

$$\langle \psi | P \phi \rangle = \int d^3r \psi^*(r) (-i\hbar \nabla) \phi(r) = \int d^3r -( -i\hbar \nabla \psi^*(r) ) \phi(r) = \int d^3r ( -i\hbar \nabla \psi(r) )^* \phi(r) = \langle P \psi | \phi \rangle$$

partielle Integration

$$\langle \psi | R \phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d^3r \psi^*(r) r \phi(r) = \langle R \psi | \phi \rangle$$

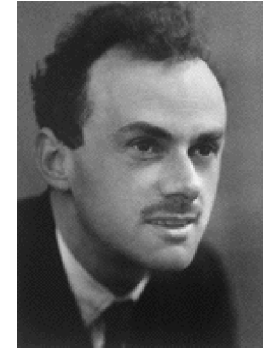
**Ü** **BSP:** Seien  $A, B$  selbstadjungiert:  $A = A^\dagger$ ,  $B = B^\dagger$

Folgende Operatoren sind selbstadjungiert:  $i[A, B]$ ,  $AB + BA$ ,  $ABA$ ,  $ABC + CBA$

$$F(A) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} F_n A^n \quad \text{mit reellen Koeffizienten } F_n \quad \Rightarrow \quad F(A) \text{ selbstadjungiert}$$

# Dirac-Notation: “Bra” & “Ket” (Paul Dirac 1928)

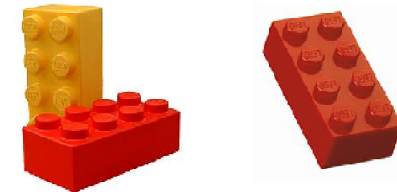
**BSP Ortsraum:**  $\phi(x), \psi(x)$  Wellenfunktionen aus  $H_R$ ,  $Q$  ein Operator auf  $H_R$



Paul Adrien Maurice Dirac  
(1902-1984)  
Nobelpreis 1933

|                                                            |                                                             |                                                                                                            |                                                                                                   |
|------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $\phi(r)$<br>$\downarrow$<br>$ \phi\rangle \in H$<br>“Ket” | $\psi(r)$<br>$\downarrow$<br>$\langle\psi  \in H'$<br>“Bra” | $\int_{-\infty}^{\infty} d^3r \psi^*(r) \phi(r)$<br>$\downarrow$<br>$\langle\psi \phi\rangle$<br>“Bracket” | $\int_{-\infty}^{\infty} d^3r \psi^*(r) Q \phi(r)$<br>$\downarrow$<br>$\langle\psi Q \phi\rangle$ |
|------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|

- Elemente eines Hilbertraums  $H$  werden als “Ket”-Vektoren  $|\phi\rangle$  bezeichnet.
- Das Objekt  $\langle\psi|$  kann man als lineare Abbildung betrachten, die aus einem “Ket”-Vektor  $|\phi\rangle$  die komplexe Zahl  $\langle\psi|\phi\rangle$  macht:  $\langle\psi| : H \rightarrow \mathbb{C}, \forall |\phi\rangle \in H: |\phi\rangle \rightarrow \langle\psi|\phi\rangle$ . Man bezeichnet  $\langle\psi|$  als “Bra”-Vektor. “Bra”-Vektoren sind lineare Funktionale auf  $H$ .



## Merke:

- Aus “Bra”  $\langle\psi|$  und “Ket”  $|\phi\rangle$  wird Bracket  $\langle\psi|\phi\rangle$
- zu jedem Ket-Vektor  $|\psi\rangle$  gibt es genau einen Bra-Vektor  $\langle\psi|$  und umgekehrt (falls  $H$  separabel)
- Der Vektorraum der Bra-Vektoren (lineare Funktionale) wird als dualer Raum  $H'$  bezeichnet.

## Projektoren:

$|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathbf{H}$  Betrachte  $P_\psi: \mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H}, \phi \rightarrow P_\psi |\phi\rangle \equiv |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle$

Das legt folgende Identifizierung nahe:  $P_\psi \equiv |\psi\rangle\langle\psi|$

$$P_\psi |\psi\rangle = |\psi\rangle$$



$$P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi P_\psi$$

$$\langle\psi|\phi\rangle = 0 \Rightarrow P_\psi |\phi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = 0$$

$$P_\psi = P_\psi^\dagger : \langle P_\psi |\alpha\rangle|\beta\rangle = \langle|\psi\rangle\langle\psi|\alpha\rangle|\beta\rangle = \langle\psi|\alpha\rangle^* \langle\psi|\beta\rangle = \langle\alpha|\psi\rangle\langle\psi|\beta\rangle = \langle\alpha|P_\psi|\beta\rangle$$



**verallgemeinerte Projektoren:**  $A \equiv |\alpha\rangle\langle\beta|$  mit  $A|\psi\rangle \equiv |\alpha\rangle\langle\beta|\psi\rangle$



$$\begin{aligned} A^\dagger &= |\beta\rangle\langle\alpha| : \langle A|\psi\rangle|\phi\rangle = \langle(|\alpha\rangle\langle\beta|)|\psi\rangle|\phi\rangle = \langle(|\alpha\rangle\langle\beta|\psi\rangle)|\phi\rangle = \langle\beta|\psi\rangle^* \langle\alpha|\phi\rangle \\ &= \langle\beta|\psi\rangle^* \langle\alpha|\phi\rangle = \langle\psi|\beta\rangle\langle\alpha|\phi\rangle = \langle\psi|A^\dagger|\phi\rangle \end{aligned}$$

$$A^\dagger A = |\beta\rangle\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta| = |\beta\rangle\langle\beta|$$

$$A A^\dagger = |\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle\langle\alpha| = |\alpha\rangle\langle\alpha|$$

# Eigenwerte und Eigenzustände

Eigenwerte und Eigenzustände eines Operators:  $A: \mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H}$

Ein Zustand  $|\phi\rangle \in \mathbf{H}$  heißt Eigenzustand des Operators  $A$  zum Eigenwert  $a$ , falls :  $A |\phi\rangle = a |\phi\rangle$

Im Allgemeinen sind Eigenwerte komplex.

a. Eigenwerte eines selbstadjungierten Operators sind reell:

BEH:  $A: \mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H}$ ,  $A = A^+$ ,  $A |\phi\rangle = a |\phi\rangle \Rightarrow a$  reell

Beweis:  $a \langle \phi | \phi \rangle = \langle \phi | A | \phi \rangle = \langle A \phi | \phi \rangle = \langle a \phi | \phi \rangle = a^* \langle \phi | \phi \rangle \Rightarrow a = a^*$

b. Eigenzustände eines selbstadjungierten Operators zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal:

BEH:  $A = A^+$ ,  $A |\phi\rangle = a_\phi |\phi\rangle$ ,  $A |\psi\rangle = a_\psi |\psi\rangle$ ,  $a_\phi \neq a_\psi \Rightarrow \langle \psi | \phi \rangle = 0$

Beweis:  $(a_\phi - a_\psi) \langle \psi | \phi \rangle \stackrel{a.}{=} \langle \psi | a_\phi \phi \rangle - \langle a_\psi \psi | \phi \rangle = \langle \psi | A | \phi \rangle - \langle A \psi | \phi \rangle$   
 $= \langle \psi | A | \phi \rangle - \langle \psi | A | \phi \rangle = 0 \Rightarrow \langle \psi | \phi \rangle = 0$

## Orthonormale Basen:

$\mathcal{B} \equiv \{|n\rangle \in \mathcal{H} : n \in \mathcal{N}\}$   $\mathcal{N}$  = Indexmenge: endlich, abzählbar unendlich, Index-Kontinuum

heißt Orthonormal-Basis (ONB) von  $\mathcal{H}$  falls **a.**  $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$

**b.**  $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \exists \psi_n \in \mathbb{C} : |\psi\rangle = \sum_{n \in \mathcal{N}} \psi_n |n\rangle$

Es gilt dann:  $\psi_m \equiv \langle m|\psi\rangle$  bzw.  $|\psi\rangle = \sum_{n \in \mathcal{N}} \langle n|\psi\rangle |n\rangle = \sum_{n \in \mathcal{N}} |n\rangle \langle n|\psi\rangle = \left( \sum_{n \in \mathcal{N}} |n\rangle \langle n| \right) |\psi\rangle$

$\Rightarrow$

$$\mathbf{1} = \sum_{n \in \mathcal{N}} |n\rangle \langle n|$$

Vollständigkeitskriterium

Basis-Darstellung eines Operators  $A$ :  $A_{mn} \equiv \langle m|A|n\rangle$  heißen Matrixelemente

$|\psi\rangle = A|\phi\rangle \Leftrightarrow \psi_m = \sum_{n \in \mathcal{N}} A_{mn} \phi_n$  Matrizen-Multiplikation

BEW:

$$|\psi\rangle = \sum_{m \in \mathcal{N}} \langle m|\psi\rangle |m\rangle = \sum_{m \in \mathcal{N}} \langle m| \mathbf{1} A |\phi\rangle |m\rangle = \sum_{m \in \mathcal{N}} \left( \sum_{n \in \mathcal{N}} \langle m|A|n\rangle \langle n|\phi\rangle \right) |m\rangle$$

**Erwartungswert und Varianz:** Es sei  $A: \mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H}$  ein Operator und  $|\psi\rangle \in \mathbf{H}$  mit  $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ :

$\langle A \rangle_\psi \equiv \langle\psi|A|\psi\rangle$  heißt Erwartungswert von  $A$  im Zustand  $|\psi\rangle$

Für selbstadjungierte Operatoren  $A = A^\dagger$  heißt

$\Delta_\psi A \equiv \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle_\psi)^2 \rangle_\psi}$  Standardabweichung (Unschärfe) von  $A$  im Zustand  $|\psi\rangle$

**BEH:**  $A$  selbstadjungiert  $\Rightarrow$  a.  $\langle\psi|A|\psi\rangle$  reell

b.  $(\Delta_\psi A)^2 = \langle A^2 \rangle_\psi - \langle A \rangle_\psi^2 \geq 0$

**BEW:** a.  $\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle A\psi|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle^* \Rightarrow \langle\psi|A|\psi\rangle$  reell

b.  $(\Delta_\psi A)^2 = \langle\psi| (A - \langle A \rangle_\psi)^2 |\psi\rangle = \langle (A - \langle A \rangle_\psi) \psi | (A - \langle A \rangle_\psi) \psi \rangle \geq 0$

$$\begin{aligned} (\Delta_\psi A)^2 &= \langle\psi| (A - \langle A \rangle_\psi)^2 |\psi\rangle = \langle\psi| A^2 + \langle A \rangle_\psi^2 - 2\langle A \rangle_\psi A |\psi\rangle \\ &= \langle\psi| A^2 |\psi\rangle + \langle A \rangle_\psi^2 \langle\psi|\psi\rangle - 2\langle A \rangle_\psi \langle\psi|A|\psi\rangle \\ &= \langle A^2 \rangle_\psi - \langle A \rangle_\psi^2 \end{aligned}$$

# Zusammenhang zwischen Erwartungswert, Varianz und Eigenwerten:

$\{ |n\rangle : n \in \mathbf{N} \}$  Basis aus Eigenzuständen von  $A$ , i.e.,  $A |n\rangle = a_n |n\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_{n \in \mathbf{N}} |n\rangle \langle n|\psi\rangle \quad \text{mit} \quad \langle \psi|\psi\rangle = 1$$

$$w_n \equiv |\langle \psi|n\rangle|^2 = \text{statistisches Gewicht von } |n\rangle \text{ im Zustand } |\psi\rangle$$

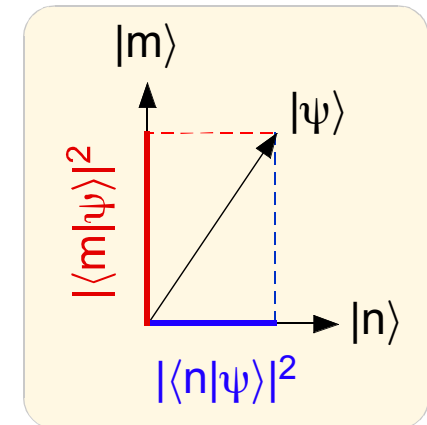
Bemerkung: ist  $A$  ein “physikalisch relevanter” Operator so bezeichnet man den index  $n \in \mathbf{N}$  seiner Eigenbasis (Basis aus Eigenzuständen) als Quantenzahl

BEH:

$$(5.1) \quad 1 = \sum_{n \in \mathbf{N}} w_n \quad \text{Pythagoras}$$

$$(5.2) \quad \langle A \rangle_\psi = \sum_{n \in \mathbf{N}} a_n w_n \quad \langle A \rangle_\psi = \text{Mittelwert der Eigenwerte bezüglich der normierten Verteilung } w_n$$

$$(5.3) \quad (\Delta_\psi A)^2 = \sum_{n \in \mathbf{N}} (a_n - \langle A \rangle_\psi)^2 w_n$$



BEW: (5.1) 
$$\sum_{n \in \mathcal{N}} w_n = \sum_{n \in \mathcal{N}} |\langle \psi | n \rangle|^2 = \sum_{n \in \mathcal{N}} \langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1$$

(5.2) 
$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_{n \in \mathcal{N}} \langle \psi | A | n \rangle \langle n | \psi \rangle = \sum_{n \in \mathcal{N}} a_n \langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle = \sum_{n \in \mathcal{N}} a_n w_n$$

(5.3) Verwende (5.2) mit  $B \equiv (A - \langle A \rangle_\psi)^2$



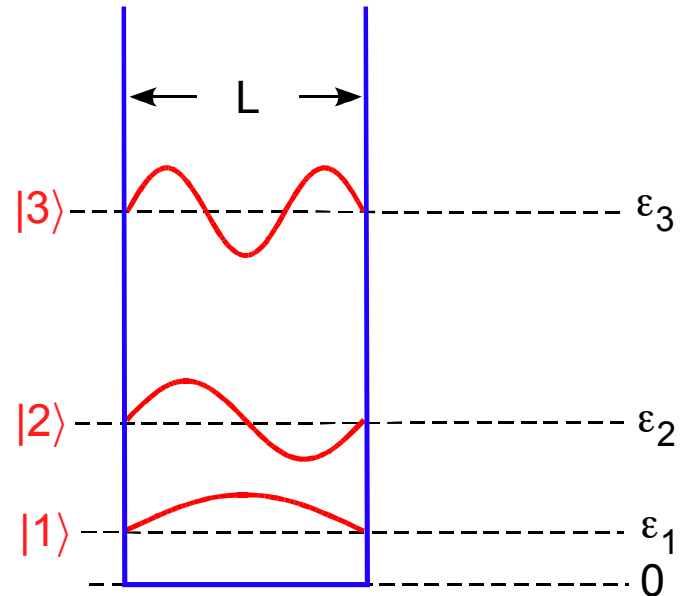
## Beispiel Potentialkasten:

Hamilton-Operator  $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + E_{\text{pot}}$

Eigenwerte von H  $\varepsilon_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$   
 $k_n = n \frac{\pi}{L}$

Eigenbasis von H  $|n\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n x)$

Quantenzahl zu H  $n \in \{1, 2, \dots\}$



Betrachte spezielle Wellenfunktion  $|\psi\rangle = \sin(\theta) |1\rangle + \cos(\theta) |2\rangle$

$$w_n \equiv |\langle \psi | n \rangle|^2 = \sin^2(\theta) \delta_{n1} + \cos^2(\theta) \delta_{n2}$$

$$\langle H \rangle_\psi = w_1 \varepsilon_1 + w_2 \varepsilon_2 = \sin^2(\theta) \varepsilon_1 + \cos^2(\theta) \varepsilon_2$$

## Unschärfe-Relation für selbstadjungierte Operatoren:

Es seien  $A, B : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  selbstadjungierte Operatoren auf  $\mathcal{H}$  und  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ :

BEH:  $C \equiv i[A, B]$  ist selbstadjungiert und es gilt  $2 \Delta_\psi A \Delta_\psi B \geq |\langle C \rangle_\psi|$

 BEW:

a.  $C^\dagger = -i[A, B]^\dagger = -i(AB)^\dagger + i(BA)^\dagger = -iB^\dagger A^\dagger + iA^\dagger B^\dagger = -iBA + iAB = i[A, B] = C$   
 $\Rightarrow C$  selbstadjungiert und  $\langle C \rangle_\psi$  reell

betrachte  $|\phi\rangle \equiv \left( A_1 - i\lambda_1 B_1 \right) |\psi\rangle$  mit

$$\begin{aligned} A_1 &\equiv A - \langle A \rangle_\psi \\ B_1 &\equiv B - \langle B \rangle_\psi \\ \lambda_1 &\equiv \frac{\langle C \rangle_\psi}{|\langle C \rangle_\psi|} \lambda, \quad \lambda \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

b.  $\lambda_1 = \text{reell}$ ,  $A_1$  und  $B_1$  selbstadjungiert

c.  $[A_1, B_1] = [A - \langle A \rangle_\psi, B - \langle B \rangle_\psi] = (A - \langle A \rangle_\psi)(B - \langle B \rangle_\psi) - (B - \langle B \rangle_\psi)(A - \langle A \rangle_\psi) = [A, B]$

d.  $(\Delta_\psi A)^2 = \langle \psi | A_1^2 | \psi \rangle$ ,  $(\Delta_\psi B)^2 = \langle \psi | B_1^2 | \psi \rangle$

$$\begin{aligned}
0 \leq \langle \phi | \phi \rangle &= \langle (A_1 - i \lambda_1 B_1) \psi | (A_1 - i \lambda_1 B_1) \psi \rangle = \langle \psi | (A_1 - i \lambda_1 B_1)^\dagger (A_1 - i \lambda_1 B_1) | \psi \rangle \\
&\stackrel{\text{b.}}{=} \langle \psi | (A_1^\dagger + i \lambda_1 B_1^\dagger) (A_1 - i \lambda_1 B_1) | \psi \rangle \stackrel{\text{b.}}{=} \langle \psi | (A_1 + i \lambda_1 B_1) (A_1 - i \lambda_1 B_1) | \psi \rangle \\
&= \langle \psi | A_1^2 + \lambda_1^2 B_1^2 - i \lambda_1 [A_1, B_1] | \psi \rangle \stackrel{\text{c.}}{=} \langle \psi | A_1^2 + \lambda_1^2 B_1^2 - i \lambda_1 [A, B] | \psi \rangle \\
&= \langle \psi | A_1^2 + \lambda_1^2 B_1^2 - \lambda_1 C | \psi \rangle = \langle \psi | A_1^2 | \psi \rangle + \lambda_1^2 \langle \psi | B_1^2 | \psi \rangle - \lambda_1 \langle \psi | C | \psi \rangle \\
&\stackrel{\text{d.}}{=} (\Delta_\psi A)^2 + \lambda_1^2 (\Delta_\psi B)^2 - \lambda_1 \langle \psi | C | \psi \rangle = (\Delta_\psi A)^2 + \lambda^2 (\Delta_\psi B)^2 - \lambda |\langle C \rangle_\psi| \\
&= (\Delta_\psi A - \lambda \Delta_\psi B)^2 + (2 \Delta_\psi A \Delta_\psi B - |\langle C \rangle_\psi|) \lambda
\end{aligned}$$

**Wähle**  $\lambda = \Delta_\psi A / \Delta_\psi B \geq 0 \quad \Rightarrow \quad 0 \leq 2 \Delta_\psi A \Delta_\psi B - |\langle C \rangle_\psi|$

**BSP:**  $[R_n, P_m] = i \hbar \delta_{nm} \quad \Rightarrow \quad \hbar \delta_{nm} \leq 2 \Delta_\psi R_n \Delta_\psi P_m$

## Definition der Observablen

Observable sind selbstadjungierte Operatoren  $A$ , für die eine Orthonormalbasis von Eigenzuständen existiert, i.e.

es gibt eine Basis  $\{|a_n\rangle \in \mathbf{H}\}$  (Eigenbasis von  $A$ ) mit  $\langle a_n | a_m \rangle = \delta_{nm}$ , sodass:  $A |a_n\rangle = \alpha_n |a_n\rangle$

$$\text{für alle } |\psi\rangle \in \mathbf{H}: |\psi\rangle = \sum_n |a_n\rangle \langle a_n | \psi \rangle \quad \Rightarrow \quad A = \sum_n \alpha_n |a_n\rangle \langle a_n| \quad \text{Spektralsatz}$$

Im Allgemeinen sind nicht alle Eigenwerte  $\alpha_n$  verschieden:

In diesem Fall ist es sinnvoll den Index  $n$  durch einen Doppelindex  $k,i$  zu ersetzen

$$A |a_{ki}\rangle = \alpha_k |a_{ki}\rangle \quad \text{mit} \quad \alpha_k \neq \alpha_{k'},$$

$$\text{für alle } |\psi\rangle \in \mathbf{H}: |\psi\rangle = \sum_{k,i} \langle a_{ki} | \psi \rangle |a_{ki}\rangle = \sum_{k,i} |a_{ki}\rangle \langle a_{ki} | \psi \rangle$$

$$\mathbf{1} = \sum_{k,i} |a_{ki}\rangle \langle a_{ki}|$$

Die Indizes der Eigenbasen werden als **Quantenzahlen** bezeichnet

In endlich dimensionalen Hilberträumen ist jeder selbstadjungierte Operator eine Observable  
(Symmetrische  $n$ -dimensionale Matrizen sind diagonalisierbar)

**Basis-Darstellung eines Operators in der Eigenbasis**  $A$ :  $A_{nm} \equiv \langle a_n | A |a_m\rangle = \alpha_n \delta_{nm}$

# Charakterisierung des Hilbertraums durch physikalische Größen

Jede Observable  $A$  besitzt eine Eigenbasis  $A |a_{ki}\rangle = \alpha_k |a_{ki}\rangle$ . Manche Eigenvektoren haben gleiche Eigenwerte, sodass die Eigenbasis nicht eindeutig mit Hilfe von  $A$  und seiner Eigenwerte beschrieben werden kann.

Frage: gibt es eine weitere Observable  $B$ , sodass für  $A$  und  $B$  eine gemeinsame ONB aus Eigenvektoren gefunden werden kann, sodass jeder Eigenvektor durch eine eindeutige Kombination aus Eigenwerten von  $A$  und  $B$  identifiziert werden kann?

Frage: welche Eigenschaften müssen zwei Observable haben, damit eine gemeinsame Eigenbasis existiert? Antwort:  $A$  und  $B$  müssen kommutieren:  $[A, B] = 0$

Eventuell müssen mehr als zwei kommutierende Observable herangezogen werden, um eine eindeutige Charakterisierung des Hilbertraums zu erreichen.

## THEOREM:

Für zwei kommutierende Observablen  $A, B$  existiert eine Orthonormalbasis  $\{|c_n\rangle \in \mathbf{H}\}$  aus gemeinsamen Eigenzuständen von  $A$  und  $B$ :

$$\text{für alle } |\psi\rangle \in \mathbf{H}: \quad |\psi\rangle = \sum_n \langle c_n | \psi \rangle |c_n\rangle, \quad \langle c_n | c_m \rangle = \delta_{nm}$$
$$A |c_n\rangle = \alpha_n |c_n\rangle \quad \text{und} \quad B |c_n\rangle = \beta_n |c_n\rangle$$

BEW: 

i)  $|c\rangle$  Eigenvektor von  $A$  zum Eigenwert  $\alpha \Rightarrow B |c\rangle$  Eigenvektor von  $A$  zum Eigenwert  $\alpha$

$$A B |c\rangle = B A |c\rangle = B \alpha |c\rangle = \alpha B |c\rangle \quad (*)$$

Es sei  $\{|c_{n,v}\rangle \in \mathbf{H}\}$  Eigenbasis von  $A$  mit  $A |c_{n,v}\rangle = \alpha_n |c_{n,v}\rangle$  mit  $\alpha_n \neq \alpha_m$  für  $n \neq m$

Alle Eigenvektoren von  $A$  zum gleichen Eigenwert  $\alpha_n$  bilden Sub-Raum  $\mathbf{H}_n$

Wegen  $(*)$  gilt für alle  $|c_n\rangle \in \mathbf{H}_n$  dass  $B |c_n\rangle \in \mathbf{H}_n$ , i.e.  $B: \mathbf{H}_n \rightarrow \mathbf{H}_n$

ii) Für  $|c_n\rangle \in \mathbf{H}_n$  und  $|c_m\rangle \in \mathbf{H}_m$  mit  $n \neq m$  folgt:  $\langle c_n | B |c_m\rangle = 0$

$$(\alpha_n - \alpha_m) \langle c_n | B |c_m\rangle = \langle \alpha_n c_n | B |c_m\rangle - \langle c_n | B | \alpha_m c_m \rangle = \langle c_n | A B |c_m\rangle - \langle c_n | B A |c_m\rangle = 0$$

$\alpha_n, \alpha_m$  reell  $[A, B] = 0$

Matrixelemente von A:

$$\langle c_{n,v} | A | c_{m,\mu} \rangle = \begin{matrix} & \begin{matrix} H_1 & H_2 & H_3 \end{matrix} \\ \begin{matrix} H_1 \\ H_2 \\ H_3 \end{matrix} & \begin{pmatrix} \boxed{\alpha_1 E_1} & & \\ & \boxed{\alpha_2 E_2} & \\ & & \boxed{\alpha_3 E_3} \\ & & & \ddots \end{pmatrix} \end{matrix}$$

$E_n \equiv \text{Einheitsmatrix in } H_n$

Matrixelemente von B:

$$\langle c_{n,v} | B | c_{m,\mu} \rangle = \begin{matrix} & \begin{matrix} H_1 & H_2 & H_3 \end{matrix} \\ \begin{matrix} H_1 \\ H_2 \\ H_3 \end{matrix} & \begin{pmatrix} \boxed{\phantom{\alpha_1 E_1}} & & \\ & \boxed{\phantom{\alpha_2 E_2}} & \\ & & \boxed{\phantom{\alpha_3 E_3}} \\ & & & \ddots \end{pmatrix} \end{matrix}$$

wegen i), ii)

Die Matrizen in den Sub-Räumen  $H_n$  sind hermitesch:  $\langle c_{n,v} | B | c_{n,v'} \rangle = \langle c_{n,v'} | B | c_{n,v} \rangle^*$   $\Rightarrow$  lineare Algebra  
 Durch eine Basis-Transformation innerhalb von  $H_n$  findet man neue Basisvektoren  $\{|b_{n,v}\rangle \in H_n\}$ ,  
 sodass  $\langle b_{n,v} | B | b_{n,v'} \rangle$  diagonal, i.e.  $\langle b_{n,v} | B | b_{n,v'} \rangle = \beta_{n,v} \delta_{vv'}$ . Die bereits diagonalen Sub-Raum  
 Matrizen  $\alpha_n E_n$  von A bleiben dabei diagonal. Die Basisvektoren  $|b_{n,v}\rangle$  sind gemeinsame  
 Eigenvektoren von A und B.

# Schrödinger-Gleichung als Operator-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle, \quad H = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} \quad (\text{S1})$$

$$P = -i\hbar \nabla$$

$$E_{\text{kin}} = P^2/2m$$

$$E_{\text{pot}} = V(R)$$

$E_{\text{kin}}$ ,  $E_{\text{pot}}$  und  $H$  sind selbstadjungiert und haben somit reelle Eigenwerte. In der Regel gibt es eine orthonormale Basis **ONB**  $\equiv \{|n\rangle \in \mathbf{H}\}$  aus Eigenvektoren von  $H$  mit reellen Eigenwerten **EV**  $\equiv \{\varepsilon_n \in \mathbb{R}\}$ , (i.e.,  $H$  ist Observable), sodass

$$H |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle \quad (\text{S2})$$

Es gilt:  $|n\rangle e^{-i \frac{\varepsilon_n}{\hbar} t}$  ist Lösung von (S1)

Die allgemeinste Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung (S1)

lautet  $|\phi(t)\rangle = \sum_n |n\rangle \exp(-i \frac{\varepsilon_n}{\hbar} t) C_n$ , wobei  $C_n$  beliebige komplexe Zahlen sind.

**BEW:** Für jede Lösung gilt  $|\phi(t)\rangle = \sum_n |n\rangle C_n(t)$  mit komplexen Funktionen  $C_n(t)$ , denn  $|n\rangle$  ist Basis.

Aus  $H |\phi(t)\rangle = \sum_n |n\rangle \varepsilon_n C_n(t)$  und  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\phi(t)\rangle = \sum_n |n\rangle i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_n(t)$  folgt  $\varepsilon_n C_n(t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_n(t)$

und somit  $C_n(t) = C_n \exp(-i \frac{\varepsilon_n}{\hbar} t)$



# Postulate der Quantenmechanik

**Q1.** Der Zustand eines physikalischen Systems zu einer festen Zeit  $t$  wird durch einen normierten Vektor  $\psi \in \mathbf{H}$  eines Hilbertraums  $\mathbf{H}$  beschrieben.

**Q2.** Jeder beobachtbaren physikalischen Größe ist eine Observable  $A: \mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H}$  zugeordnet.

**Q3.** Das Ergebnis der Messung einer physikalischen Größe ist ein Eigenwert der zugeordneten Observablen

**Q4.** Die Wahrscheinlichkeit im Zustand  $\psi$  den Eigenwert  $\alpha$  einer Observablen  $A$  zu messen ist:

$$w(\alpha) = \sum_{\{a: a \text{ ist EV zu } \alpha\}} |\langle a | \psi \rangle|^2$$

**Q5.** Eine Messung des Eigenwerts  $\alpha$  einer Observablen  $A$  im Zustand  $\psi$  überführt das System in den neuen (projizierten) Zustand:

$$\frac{P_\alpha \psi}{\sqrt{\langle P_\alpha \psi | P_\alpha \psi \rangle}} \quad \text{mit} \quad P_\alpha |\psi\rangle = \sum_{\{a: a \text{ ist EV zu } \alpha\}} |a\rangle \langle a | \psi \rangle \quad P_\alpha = \text{Projektor auf den Unterraum aller Eigenvektoren zum Eigenwert } \alpha$$

**Q6.** Die zeitliche Entwicklung eines Zustands  $|\psi\rangle$  wird durch die Schrödinger Gleichung bestimmt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle, \quad H \equiv \text{Operator der Gesamt-Energie (Hamilton-Operator)}$$

## Folgerung

Betrachte eine Serie von unabhängigen Messungen  $\alpha_i$ ,  $i = 1, \dots$  einer Observablen  $A$  im Zustand  $\psi$

BEH: Der mittlere Meßwert  $\bar{\alpha}$  ist der Erwartungswert:  $\langle \psi | A | \psi \rangle$

BEW:

$$\begin{aligned}\bar{\alpha} &\stackrel{\text{Q3}}{=} \sum_{\{\text{Eigenwerte } \alpha\}} \alpha w(\alpha) \stackrel{\text{Q4}}{=} \sum_{\{\text{Eigenwerte } \alpha\}} \sum_{\{a \text{ ist EV zu } \alpha\}} \alpha |\langle a | \psi \rangle|^2 \\ &= \sum_{\{a \text{ ist EV}\}} \alpha |\langle a | \psi \rangle|^2 = \sum_{\{a \text{ ist EV}\}} \alpha \langle \psi | a \rangle \langle a | \psi \rangle = \sum_{\{a \text{ ist EV}\}} \langle A \psi | a \rangle \langle a | \psi \rangle \\ &= \langle A \psi | \left( \sum_{\{a \text{ ist EV}\}} |a\rangle \langle a| \right) | \psi \rangle = \langle A \psi | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle\end{aligned}$$

Beispiel Ortsmessung:

Q3.  $\rightarrow$  Das Ergebnis einer Ortsmessung ist ein Eigenwert des Ortsoperators  $R$

Q4.  $\rightarrow$  Die Wahrscheinlichkeit im Zustand  $\psi$  den Eigenwert  $r$  der Observablen  $R$  zu messen ist:

$$w(r) = \sum_{\{|r\rangle \text{ ist EV zu } r\}} |\langle r | \psi \rangle|^2 = |\langle r | \psi \rangle|^2 = \left| \int d^3r' \delta(r' - r) \psi(r') \right|^2 = |\psi(r)|^2$$

## Korrespondenz zwischen klassischen Größen und Observablen:

Klassische physikalische Größen lassen sich als Funktion von Ort und Impuls schreiben:  $A = A(r, p)$ . Für Funktionen  $A(r)$  bzw.  $A(p)$  erhält man die korrespondierenden quantenmechanischen Größen indem man Orts und Impuls-Variable durch die Operatoren  $R$  und  $P$  ersetzt.

Da  $[R_\nu, P_\mu] = i\hbar \delta_{\nu\mu} \neq 0$  ist diese Ersetzung für Funktionen  $A(r, p)$  nicht eindeutig. In diesem Fall ist die Ersetzungsvorschrift durch eine Symmetrisierungsregel zu ergänzen:

**BSP:**  $A(r, p) = F(r_x \cdot p_x)$

$R_x \cdot P_x$  ist kein selbstadjungierter Operator:  $(R_x \cdot P_x)^+ = P_x^+ \cdot R_x^+ = P_x \cdot R_x \neq R_x \cdot P_x$

jedoch  $\frac{1}{2}(R_x \cdot P_x + P_x \cdot R_x)$  ist selbstadjungiert.

Man ersetzt zunächst  $r_x \cdot p_x \rightarrow \{r_x, p_x\} \equiv (r_x \cdot p_x + p_x \cdot r_x)/2$  und dann  $r_x, p_x \rightarrow R_x, P_x$

Für komplexere Funktionen  $A(r, p)$  ist die Zuordnung eines selbstadjungierten Operators nicht eindeutig.

**BSP:**  $A(r, p) = F(r_x \cdot r_x \cdot p_x)$

Sowohl  $R_x \cdot P_x \cdot R_x$  als auch  $\frac{1}{2}(R_x \cdot R_x \cdot P_x + P_x \cdot R_x \cdot R_x)$  sind selbstadjungiert

Die Quantenmechanik kennt viele Observable, für die es kein klassisches Analogon gibt.

# Störung eines beschränkten Operators:



**Fragestellung:** Wie verändern sich Eigenwerte eines selbstadjungierten Operators  $A$  unter dem Einfluß einer kleinen Störung  $\lambda S$ .

$A, S$  seien beschränkte Operatoren auf  $\mathbf{H}$ , i.e.,  $\exists$  positive Konstanten  $c_A, c_S$  :

$$|\langle \phi | A | \psi \rangle|^2 < c_A \langle \phi | \phi \rangle \langle \psi | \psi \rangle, \quad |\langle \phi | S | \psi \rangle|^2 < c_S \langle \phi | \phi \rangle \langle \psi | \psi \rangle \quad \text{für alle } \phi, \psi \in \mathbf{H}$$

$A |a\rangle = \alpha |a\rangle$ ,  $|a\rangle$  normiert  $\langle a | a \rangle = 1$

$B \equiv A + \lambda S$ ,  $\lambda S$  bewirke nur eine kleine Störung von  $A$ :  $\lambda$  reell positiv,  $\lambda \ll 1$

**Gesucht:** Eigenwert  $\beta$  von  $B$ , sodass:

$B |b\rangle = \beta |b\rangle$  mit  $|b\rangle \approx |a\rangle + \varepsilon |a'\rangle$ ,  $\langle a | a' \rangle = 0$ ,  $\langle a' | a' \rangle = 1$ ,  $\varepsilon$  reell positiv,  $\lambda \ll 1 \Rightarrow \varepsilon \ll 1$

$$\beta = \langle b | B | b \rangle = \langle a | B | a \rangle + \varepsilon \langle a | B | a' \rangle + \varepsilon \langle a' | B | a \rangle + \varepsilon^2 \langle a' | B | a' \rangle$$

$$= \langle a | A | a \rangle + \varepsilon \cancel{\langle a | A | a' \rangle} + \varepsilon \cancel{\langle a' | A | a \rangle} + \varepsilon^2 \langle a' | A | a' \rangle \quad \text{verwende: } A=A^\dagger, \langle a | a' \rangle = 0, A|a\rangle = \alpha |a\rangle$$

$$+ \lambda \langle a | S | a \rangle + \lambda \varepsilon \langle a | S | a' \rangle + \lambda \varepsilon \langle a' | S | a \rangle + \lambda \varepsilon^2 \langle a' | S | a' \rangle$$

$$= \alpha + \varepsilon^2 \cancel{\langle a' | A | a' \rangle} + \lambda \langle a | S | a \rangle + \lambda \varepsilon \cancel{\langle a | S | a' \rangle} + \lambda \varepsilon \cancel{\langle a' | S | a \rangle} + \lambda \varepsilon^2 \cancel{\langle a' | S | a' \rangle}$$

$$\approx \alpha + \lambda \langle a | S | a \rangle = \alpha + \langle a | \lambda S | a \rangle \quad \text{verwende: } \varepsilon \ll 1, \lambda \ll 1, |\langle a' | A | a' \rangle|^2 < c_A, |\langle a | S | a' \rangle|^2 < c_S$$

# Eigenwerte und Eigenvektoren des Orts – und Impuls-Operators



|                             |                                                                                         |   |  |
|-----------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------|---|--|
| Ortsraum $\mathbf{H}_R$ :   | $R : \mathbf{H}_R \rightarrow \mathbf{H}_R, \quad R \psi(r) = r \psi(r)$                | } |  |
|                             | $P : \mathbf{H}_R \rightarrow \mathbf{H}_R, \quad P \psi(r) = -i\hbar \nabla_r \psi(r)$ |   |  |
| Impulsraum $\mathbf{H}_P$ : | $R : \mathbf{H}_P \rightarrow \mathbf{H}_P, \quad R \phi(p) = i\hbar \nabla_p \phi(p)$  | } |  |
|                             | $P : \mathbf{H}_P \rightarrow \mathbf{H}_P, \quad P \phi(p) = p \phi(p)$                |   |  |

Wirkungsweise von  $P$  in  $\mathbf{H}_P$ :

$$FT [ P\psi(r) ] = FT [ -i\hbar \nabla_r \psi(r) ] = -i\hbar FT [ \nabla_r \psi(r) ] = \hbar k \phi(k) = p \phi(p)$$

Wirkungsweise von  $R$  in  $\mathbf{H}_P$ :

$$FT [ R\psi(r) ] = FT [ r \psi(r) ] = i \nabla_k FT [ \psi(r) ] = i \nabla_k \phi(k) = i\hbar \nabla_p \phi(p)$$

Es zeigt sich:  $R$  und  $P$  besitzen keine Eigenvektoren in  $\mathbf{H}_R$  bzw.  $\mathbf{H}_P$   
jedoch in den größeren Räumen  $\mathbf{H}'_R$  und  $\mathbf{H}'_P$

$\mathbf{H}'_R \supset \mathbf{H}_R$ ,  $\mathbf{H}'_R$  = Raum aller Funktionen  $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$  (inkl. Dirac'scher Delta-Funktion)

$\mathbf{H}'_P \supset \mathbf{H}_P$ ,  $\mathbf{H}'_P$  = Raum aller Funktionen  $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$

Eigenvektoren von R und P in  $\mathbf{H}_R$ :

$$\begin{aligned} |r_0\rangle &\equiv \delta(r-r_0) & R|r_0\rangle &= R \delta(r-r_0) = r \delta(r-r_0) = r_0 \delta(r-r_0) = r_0 |r_0\rangle \\ |p_0\rangle &\equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i \frac{p_0}{\hbar} r} & P|p_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P e^{i \frac{p_0}{\hbar} r} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} p_0 e^{i \frac{p_0}{\hbar} r} = p_0 |p_0\rangle \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} |r_0\rangle &\equiv \delta(r-r_0) \\ |p_0\rangle &\equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i \frac{p_0}{\hbar} r} \end{aligned}} \right\} \notin \mathbf{H}_R$$

Eigenvektoren von R und P in  $\mathbf{H}_P$ :

$$\begin{aligned} |r_0\rangle &\equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i \frac{p}{\hbar} r_0} & R|r_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} R e^{-i \frac{p}{\hbar} r_0} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} r_0 e^{-i \frac{p}{\hbar} r_0} = r_0 |r_0\rangle \\ |p_0\rangle &\equiv \delta(p-p_0) & P|p_0\rangle &= P \delta(p-p_0) = p \delta(p-p_0) = p_0 \delta(p-p_0) = p_0 |p_0\rangle \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} |r_0\rangle &\equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i \frac{p}{\hbar} r_0} \\ |p_0\rangle &\equiv \delta(p-p_0) \end{aligned}} \right\} \notin \mathbf{H}_P$$



**Resumé:** R, P haben keine Eigenvektoren in  $\mathbf{H}_R$  bzw.  $\mathbf{H}_P$ . Jedoch:  $\mathbf{H}_R$  bzw.  $\mathbf{H}_P$  sind in größere Räume eingebettet, in denen Eigenzustände für R und P existieren. Diese bilden eine Orthonormalbasis:

$$\begin{aligned} \langle r|r'\rangle &= \delta(r - r'), & \int d^3r |r\rangle \langle r| &= \mathbf{1} \\ \langle p|p'\rangle &= \delta(p - p'), & \int d^3p |p\rangle \langle p| &= \mathbf{1} \end{aligned}$$

**BEW:**

$$\langle r|\psi(r')\rangle = \int d^3r' \delta(r'-r) \psi(r') = \psi(r) \Rightarrow \left( \int d^3r |r\rangle \langle r| \right) \psi(r') = \int d^3r |r\rangle \psi(r) = \int d^3r \delta(r'-r) \psi(r) = |\psi(r')\rangle$$

$$\langle p|\psi(r)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d^3r e^{-i \frac{p}{\hbar} r} \psi(r) = \phi(p) \Rightarrow \left( \int d^3r |p\rangle \langle p| \right) \psi(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d^3r e^{i \frac{p}{\hbar} r} \phi(p) = |\psi(r)\rangle$$

## Ü BSP: Erwartungswerte und Varianz von R, P:

Betrachte Ortsraum  $\mathbf{H}_R$ :  $R: \mathbf{H}_R \rightarrow \mathbf{H}_R$ ,  $R |\psi(r)\rangle = r |\psi(r)\rangle$

$$\langle r | \psi(r') \rangle = \int d^3r' \delta(r' - r) \psi(r') = \psi(r)$$

$$\langle R \rangle \equiv \langle \psi(r) | R | \psi(r) \rangle = \int d^3r \psi^*(r) r \psi(r) = \int d^3r \underbrace{r}_{\langle r \rangle} |\psi(r)|^2 = \int d^3r \underbrace{r}_{\substack{\text{Eigenwert} \\ \text{von R zum} \\ \text{Eigenvektor } |r\rangle}} \underbrace{|\langle r | \psi(r) \rangle|^2}_{w_r \text{ vergl. (5.2)}}$$

$$(\Delta R)^2 \equiv \langle \psi(r) | (R - \langle R \rangle)^2 | \psi(r) \rangle = \int d^3r \psi^*(r) (r - \langle R \rangle)^2 \psi(r) = \int d^3r (r - \langle r \rangle)^2 |\psi(r)|^2 = (\Delta r)^2$$

Betrachte Impulsraum  $\mathbf{H}_P$ :  $P: \mathbf{H}_P \rightarrow \mathbf{H}_P$ ,  $P |\phi(p)\rangle = p |\phi(p)\rangle$

$$\langle P \rangle \equiv \langle \phi(p) | P | \phi(p) \rangle = \int d^3p \phi^*(p) p \phi(p) = \int d^3p p |\phi(p)|^2 = \langle p \rangle$$

$$(\Delta P)^2 \equiv \langle \phi(p) | (P - \langle P \rangle)^2 | \phi(p) \rangle = \int d^3p \phi^*(p) (p - \langle P \rangle)^2 \phi(p) = \int d^3p (p - \langle p \rangle)^2 |\phi(p)|^2 = (\Delta p)^2$$

# Ü Ehrenfest Theorem

$A(t)$  ein Operator auf  $\mathbf{H}$  und  $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$ ,  $H \equiv$  Hamilton-Operator

$$\frac{d}{dt} \langle A(t) \rangle_\psi = \frac{1}{i\hbar} \langle [A(t), H] \rangle_\psi + \left\langle \frac{\partial}{\partial t} A(t) \right\rangle_\psi$$

Im Ortsraum sei  $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$  mit Hamilton-Operator  $H \equiv P^2/2m + V(R)$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} \langle R \rangle_\psi &= \frac{1}{m} \langle P \rangle_\psi \\ \frac{d}{dt} \langle P \rangle_\psi &= \langle \nabla V(R) \rangle_\psi \end{aligned}$$

Falls  $\langle \nabla V(R) \rangle_\psi = \nabla V(\langle R \rangle_\psi)$ , bewegt sich  $\langle R \rangle_\psi$  auf einer Newton'schen Bahn

Achtung, im Allgemeinen ist  $\langle \nabla V(R) \rangle_\psi \neq \nabla V(\langle R \rangle_\psi)$

Betrachte ein extrem lokalisiertes Wellenpaket mit  $|\psi(r)|^2 \approx \delta(r - \langle R \rangle_\psi)$

$$\langle \nabla V(R) \rangle_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} dr \, \psi(r)^* \nabla V(r) \psi(r) \approx \nabla V(\langle R \rangle_\psi)$$



# Mehrteilchen-Wellenfunktionen

BSP zwei Teilchen:

Gegeben seien zwei Einteilchen-Wellenfunktionen  $\phi(r_1), \psi(r_2) \in \mathbf{H}$ , die zwei voneinander unabhängige Teilchen (1) und (2) beschreiben.

Die gemeinsame Zweiteilchen-Wellenfunktion ist das Produkt  $\phi(r_1) \cdot \psi(r_2)$ . In diesem Fall ist

$$|\phi(r_1) \cdot \psi(r_2)|^2 = |\phi(r_1)|^2 |\psi(r_2)|^2$$

i.e., man hat unkorrelierte Wahrscheinlichkeitsdichten. Position von Teilchen (1) hängt nicht von Position von Teilchen (2) ab und umgekehrt.

Gemäß Superpositionsprinzip sind alle Superpositionen von Produktwellenfunktionen zulässige Wellenfunktionen. Diese bilden den Produktraum:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} \otimes \mathbf{H} &\equiv \{ \text{Alle Linear-Kombinationen von } \phi(r_1) \cdot \psi(r_2) \} \\ &= \{ \text{Alle quadrat-integrablen Funktionen } \chi(r_1, r_2) \text{ der Variablen } r_1, r_2 \} \end{aligned}$$

Die allermeisten Mitglieder von  $\mathbf{H} \otimes \mathbf{H}$  sind keine Produktzustände und werden als verschränkt bezeichnet.

BSP für verschränkten Zustand:  $\frac{1}{\sqrt{2}} ( \phi(r_1) \cdot \psi(r_2) + \psi(r_1) \cdot \phi(r_2) )$



# Produkt-Räume:

Seien  $\mathbf{H}_A$  und  $\mathbf{H}_B$  zwei Hilberträume,  $|a\rangle \in \mathbf{H}_A$ ,  $|b\rangle \in \mathbf{H}_B$ :

Produkt-Zustände:  $|a\rangle \otimes |b\rangle \equiv |a\rangle|b\rangle \equiv |a, b\rangle$

mit  $\lambda |a\rangle \otimes |b\rangle \equiv (\lambda |a\rangle) \otimes |b\rangle \equiv |a\rangle \otimes (\lambda |b\rangle)$

$$|a_1\rangle \otimes |b\rangle + |a_2\rangle \otimes |b\rangle \equiv (|a_1\rangle + |a_2\rangle) \otimes |b\rangle$$

$$|a\rangle \otimes |b_1\rangle + |a\rangle \otimes |b_2\rangle \equiv |a\rangle \otimes (|b_1\rangle + |b_2\rangle)$$

Skalarprodukt:  $\langle |a_1\rangle \otimes |b_1\rangle | |a_2\rangle \otimes |b_2\rangle \rangle \equiv \langle a_1|a_2\rangle \langle b_1|b_2\rangle$

Produkt-Raum:  $\mathbf{H}_A \otimes \mathbf{H}_B \equiv \{ \text{Alle Linear-Kombinationen von Produkten } |a\rangle \otimes |b\rangle \}$

Bemerkung: Die meisten Zustände in  $\mathbf{H}_A \otimes \mathbf{H}_B$  sind keine Produkte

$$\text{z. B. : } |\psi\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} ( |a_1\rangle \otimes |b_1\rangle + |a_2\rangle \otimes |b_2\rangle )$$

Solche Zustände heißen verschränkt



Es seien  $A : \mathbf{H}_A \rightarrow \mathbf{H}_A$  ,  $B : \mathbf{H}_B \rightarrow \mathbf{H}_B$  Operatoren auf  $\mathbf{H}_A$  bzw.  $\mathbf{H}_B$  :

Produkt-Operator:  $A \otimes B : \mathbf{H}_A \otimes \mathbf{H}_B \rightarrow \mathbf{H}_A \otimes \mathbf{H}_B$

$$A \otimes B |a\rangle \otimes |b\rangle \equiv A |a\rangle \otimes B |b\rangle$$

$$A \otimes B \sum_{n \in \mathbf{N}} c_n |a_n\rangle \otimes |b_n\rangle \equiv \sum_{n \in \mathbf{N}} c_n A |a_n\rangle \otimes B |b_n\rangle$$

Natürliche Erweiterung eines Operators  $A : \mathbf{H}_A \rightarrow \mathbf{H}_A$  :  $A \otimes 1_B |a\rangle \otimes |b\rangle \equiv A |a\rangle \otimes |b\rangle$   
 $1_B \equiv$  Einheitsoperator auf  $\mathbf{H}_B$

# 6. Elementare Quantensysteme

# Eindimensionaler harmonischer Oszillator

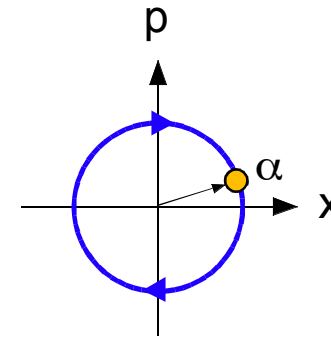
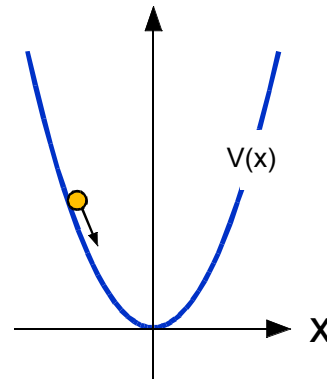
## Klassischer Fall:

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 x^2, \quad \omega = \text{Schwingungsfrequenz im Potential } V(x) = \frac{m}{2} \omega^2 x^2$$

$$\frac{d^2}{dt^2} x = - \frac{1}{m} \frac{d}{dx} V(x) = - \omega^2 x$$

$$x(t) = x_0 \sin(\omega t + \theta)$$

$$p(t) = m \omega x_0 \cos(\omega t + \theta)$$



Phasenraum-Darstellung

Definiere einheitenlose Größe:

$$\alpha \equiv \frac{1}{\sqrt{2}\xi} x + i \frac{\xi}{\sqrt{2}\hbar} p, \quad \xi \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = \text{Längeneinheit}$$

$$x = \frac{\xi}{\sqrt{2}} (\alpha^* + \alpha) = \sqrt{2} \xi \operatorname{Re}(\alpha)$$

$$p = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}\xi} (\alpha^* - \alpha) = \sqrt{2m\xi} \operatorname{Im}(\alpha)$$

$\Rightarrow$

$$H(x,p) = \hbar\omega \alpha^* \alpha$$

$$\alpha(t) = \alpha(0) e^{-i\omega t}, \quad \alpha(0) = i e^{-i\theta} x_0 / (2^{1/2} \xi)$$

# Eindimensionaler harmonischer Oszillator

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 X^2, \quad \omega = \text{Schwingungsfrequenz im Potential } V(x) = \frac{m}{2} \omega^2 x^2$$

Definiere einheitenlose Operatoren:  $a \equiv \frac{1}{\sqrt{2}\xi} X + i \frac{\xi}{\sqrt{2}\hbar} P$ ,  $\xi \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

$$N \equiv a^+ a$$

Ü Eigenschaften von  $a$  bzw.  $N$ :

6.1)  $a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}\xi} X - i \frac{\xi}{\sqrt{2}\hbar} P$  adjungierter Operator

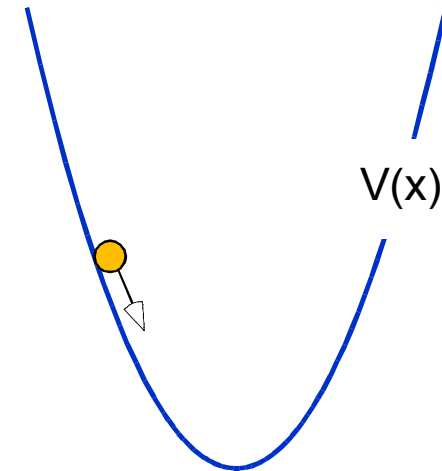
6.2)  $X = \frac{\xi}{\sqrt{2}} (a^+ + a)$ ,  $P = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}\xi} (a^+ - a)$

6.3)  $[a, a^+] = 1$

6.4)  $N^+ = N$

6.5)  $H = \hbar\omega (N + \frac{1}{2})$  es folgt, dass die Eigenvektoren von  $H$  und  $N$  identisch sind

6.6)  $2N = \frac{1}{\xi^2} X^2 - \xi^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - 1$



Verwende  $X^+ = X$ ,  $P^+ = P$ ,  $[X, P] = i\hbar$ ,  $P = -i\hbar \frac{\partial}{\partial X}$ ,  $\xi^2 = \frac{\hbar}{m\omega}$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}\xi} X + i \frac{\xi}{\sqrt{2}\hbar} P, \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}\xi} X - i \frac{\xi}{\sqrt{2}\hbar} P$$

BEW zu 6.3):

$$\begin{aligned} [a, a^+] &= \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} \cancel{\xi^{-1}} X, -i \frac{1}{\sqrt{2}} \cancel{\xi} \hbar^{-1} P \right] + \left[ i \frac{1}{\sqrt{2}} \cancel{\xi} \hbar^{-1} P, \frac{1}{\sqrt{2}} \cancel{\xi^{-1}} X \right] \\ &= \frac{1}{2} [X, -i\hbar^{-1}P] + \frac{1}{2} [i\hbar^{-1}P, X] = -i\hbar^{-1} \frac{1}{2} [X, P] + i\hbar^{-1} \frac{1}{2} [P, X] = -i\hbar^{-1} [X, P] = 1 \end{aligned}$$

BEW zu 6.6):

$$\begin{aligned} 2N &= 2a^+a = 2 \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \xi^{-1} X - i \frac{1}{\sqrt{2}} \xi \hbar^{-1} P \right) \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \xi^{-1} X + i \frac{1}{\sqrt{2}} \xi \hbar^{-1} P \right) \\ &= \xi^{-2} X^2 + \xi^2 \hbar^{-2} P^2 + i \hbar^{-1} X P - i \hbar^{-1} P X \\ &= \xi^{-2} X^2 + \xi^2 \hbar^{-2} P^2 + i \hbar^{-1} [X, P] = \xi^{-2} X^2 + \xi^2 \hbar^{-2} P^2 - 1 = \frac{1}{\xi^2} X^2 - \xi^2 \frac{\partial^2}{\partial X^2} - 1 \end{aligned}$$

BEW zu 6.5):  $2N + 1 \stackrel{(6.6)}{=} \xi^{-2} X^2 + \xi^2 \hbar^{-2} P^2$

$$\Rightarrow 2\hbar\omega (N + 1/2) = m\omega^2 X^2 + m^{-1} P^2 = 2H$$

## Struktur der Eigenwerte und Eigenzustände von N:

6.7) Sei  $\psi_0$  Eigenvektor von N zum Eigenwert  $c_0$ :  $N \psi_0 = c_0 \psi_0$ ,  $\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1$  dann folgt:

$$c_0 \text{ reell und } c_0 \geq 0 \text{ und für } n = 1, 2, 3, \dots \text{ ist } \psi_n \equiv \frac{1}{(1 + c_0)^{1/2} \dots (n + c_0)^{1/2}} (a^+)^n \psi_0$$

Eigenvektor zum Eigenwert  $c_n \equiv n + c_0$  (Leiter äquidistanter Eigenzustände)

6.8) Für  $\psi_0(x) \equiv \frac{1}{\pi^{1/4} \xi^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{\xi}\right)^2\right)$  gilt:  $\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1$ ,  $N \psi_0 = 0$

und somit ist  $\psi_0$  ein Eigenvektor von N zum Eigenwert  $c_0 = 0$ . Es folgt:  $\psi_n = (n!)^{-1/2} (a^+)^n \psi_0$  ist Eigenvektor zum Eigenwert  $c_n = n$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ .

 BEW: 6.7)  $c_0 = \langle \psi_0 | N \psi_0 \rangle = \langle a \psi_0 | a \psi_0 \rangle \geq 0$

$$n = 1: N a^+ \psi_0 = a^+ a a^+ \psi_0 \stackrel{(6.3)}{=} a^+ (1 + N) \psi_0 \stackrel{(6.7)}{=} (1 + c_0) a^+ \psi_0$$

$$\langle a^+ \psi_0 | a^+ \psi_0 \rangle = \langle a a^+ \psi_0 | \psi_0 \rangle \stackrel{(6.3)}{=} \langle (1 + N) \psi_0 | \psi_0 \rangle = (1 + c_0)$$

Definiere:  $\psi_1 \equiv (1 + c_0)^{-1/2} a^+ \psi_0$  dann folgt  $\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = 1$ ,  $N \psi_1 = (1 + c_0) \psi_1$

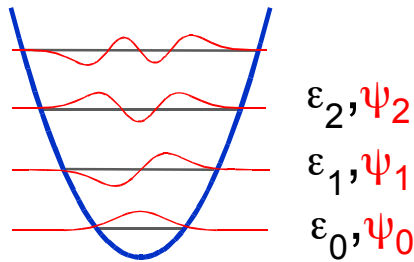
$$\text{BEW: 6.8) } 2N \psi_0 \stackrel{(6.6)}{=} \left( \frac{1}{\xi^2} x^2 - \xi^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - 1 \right) \psi_0 = 0$$



## Eigenwerte und Eigenzustände von H: $\varepsilon \phi = H \phi$

(6.5),(6.7)

$$6.9) \quad H \psi_n = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \psi_n$$



$$\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} \xi^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{\xi}\right)^2\right)$$

$$\psi_n \stackrel{(6.7)}{=} \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n \psi_0 \stackrel{(6.1)}{=} \frac{1}{\sqrt{n!} 2^n} H_n(x/\xi) \psi_0(x)$$

$H_n(z)$  = Hermite-Polynom n-ter Ordnung

$$H_n(z) = \left( 2z - \frac{\partial}{\partial z} \right)^n 1$$

### 6.10) Bedeutung der Leiter-Operatoren $a^+$ und $a$ :

$$a^+ \psi_n = (n+1)^{1/2} \psi_{n+1} \quad \text{für } n \geq 0$$

Erzeuger-Operator:  
erzeugt ein Oszillator-Quant

$$a \psi_n = n^{1/2} \psi_{n-1} \quad \text{für } n > 0$$

Vernichter-Operator:  
vernichtet ein Oszillator-Quant

$$a \psi_0 = 0$$

$$N \psi_n = n \psi_n \quad \text{für } n \geq 0$$

Zähl-Operator: zählt die  
Anzahl angeregter Oszillator-Quanten

# Harmonischer Oszillator auf einen Blick:

Eigenwerte:  $\varepsilon_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$  Äquidistante Energieniveaus

Eigenzustände:  $\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n! 2^n}} \frac{1}{\pi^{1/4} \xi^{1/2}} H_n(z) \exp(-z^2/2)$ ,  $z = x / \xi$

Grundzustand:  $\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} \xi^{1/2}} \exp(-z^2/2)$ ,

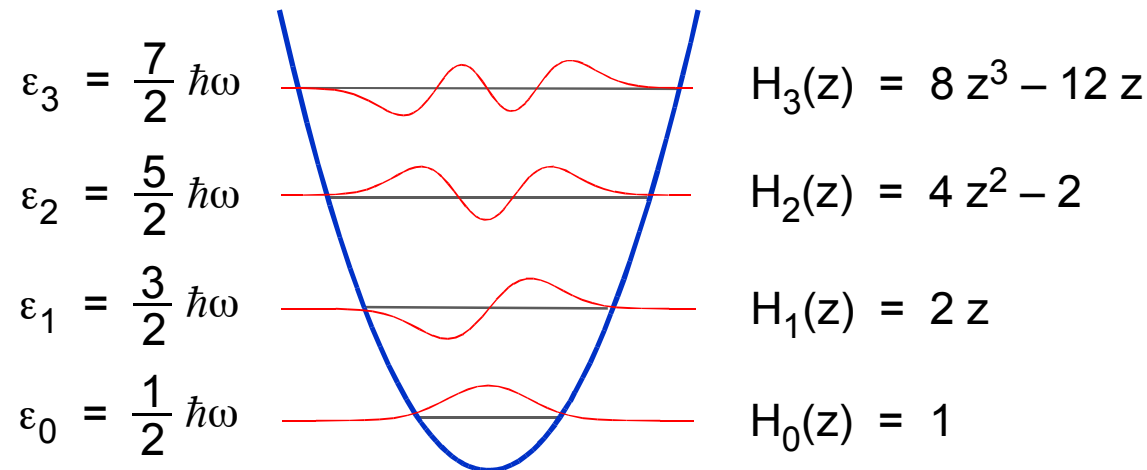
1/e - Radius der Aufenthaltswahrscheinlichkeit:  $\xi$

Stationäre Lösungen der zeitabhängigen Schrödinger Gleichung:

$$\psi_n(x,t) = \psi_n(x) \exp(-i \frac{\varepsilon_n}{\hbar} t)$$

Erzeuger & Vernichter:  $a^+ \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}$ ,  $a \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1}$

Allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödinger Gleichung:  $\psi(x,t) = \sum_n \chi_n \psi_n(x,t)$



## Quasi-klassische Zustände:

Die Zustände scharfer Energie  $\psi_n$  sind über das gesamte Potential delokalisiert und haben wenig Ähnlichkeit mit den vertrauten Zuständen des klassischen Oszillators

Im Zustand  $\psi_n$  gilt:

$$\langle X \rangle_n = \langle \psi_n | X | \psi_n \rangle = 0$$

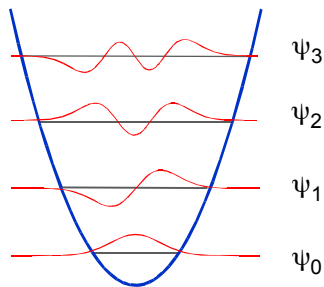
$$\Delta_n X = \xi \sqrt{n + 1/2}$$

$$\langle P \rangle_n = \langle \psi_n | P | \psi_n \rangle = 0$$

$$\Delta_n P = \frac{\hbar}{\xi} \sqrt{n + 1/2}$$

$$\Delta_n X \Delta_n P = (n + 1/2) \hbar$$

→ nur für  $n = 0$  minimales Unschärfe-Produkt



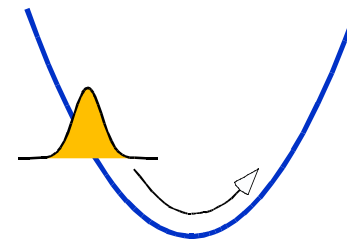
Frage: was sind die maximal klassischen Zustände, welche die Quantenmechanik zulässt?

Von solchen quasi-klassischen Zuständen erwartet man

minimale Unschärfe:  $\Delta X \Delta P = \hbar/2$

oszillierende Erwartungswerte:  $\langle X \rangle \propto \cos(\omega t - \theta)$

$$\langle P \rangle = m \frac{\partial}{\partial t} \langle X \rangle$$



Beh:  $\langle X \rangle_n = \langle \psi_n | X | \psi_n \rangle = 0$ ,  $\langle P \rangle_n = \langle \psi_n | P | \psi_n \rangle = 0$

Bew:

$$\langle \psi_n | X | \psi_n \rangle \stackrel{(6.2)}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \xi \langle \psi_n | (a + a^\dagger) | \psi_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \xi (\langle \psi_n | a | \psi_n \rangle + \langle a | \psi_n \rangle) \stackrel{(6.10)}{=} 0$$

$$\langle \psi_n | P | \psi_n \rangle \stackrel{(6.2)}{=} i\hbar \frac{1}{\sqrt{2}} \xi^{-1} \langle \psi_n | (a - a^\dagger) | \psi_n \rangle = i\hbar \frac{1}{\sqrt{2}} \xi^{-1} (\langle \psi_n | a | \psi_n \rangle - \langle a | \psi_n \rangle) \stackrel{(6.10)}{=} 0$$

Beh:  $\Delta_n X = \xi \sqrt{n+1/2}$ ,  $\Delta_n P = \frac{\hbar}{\xi} \sqrt{n+1/2}$ ,  $\Delta_n X \Delta_n P = (n + 1/2) \hbar$

Bew:

$$\begin{aligned} (\Delta_n X)^2 &= \langle X^2 \rangle_n \stackrel{(6.2)}{=} \frac{1}{2} \xi^2 \langle \psi_n | (aa + a^\dagger a^\dagger + \textcolor{blue}{aa}^\dagger + a^\dagger a) | \psi_n \rangle \stackrel{(6.3)}{=} \frac{1}{2} \xi^2 \langle \psi_n | (aa + a^\dagger a^\dagger + 1 + 2N) | \psi_n \rangle \\ &\stackrel{(6.10)}{=} \frac{1}{2} \xi^2 \langle \psi_n | (1 + 2N) | \psi_n \rangle = \frac{1}{2} \xi^2 (1 + 2n) = \xi^2 (1/2 + n) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\Delta_n P)^2 &= \langle P^2 \rangle_n \stackrel{(6.2)}{=} -\frac{1}{2} \xi^{-2} \hbar^2 \langle \psi_n | (aa + a^\dagger a^\dagger - \textcolor{blue}{aa}^\dagger - a^\dagger a) | \psi_n \rangle \stackrel{(6.3)}{=} -\frac{1}{2} \xi^{-2} \hbar^2 \langle \psi_n | (aa + a^\dagger a^\dagger - 1 - 2N) | \psi_n \rangle \\ &\stackrel{(6.10)}{=} \frac{1}{2} \xi^{-2} \hbar^2 \langle \psi_n | (1 + 2N) | \psi_n \rangle = \frac{1}{2} \xi^{-2} \hbar^2 (1 + 2n) = \xi^{-2} \hbar^2 (1/2 + n) \end{aligned}$$

Definiere “quasi-klassische” Zustände:  $\forall \alpha \in \mathbb{C} : \phi_\alpha \equiv \exp(-\frac{|\alpha|^2}{2}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \psi_n$

6.11) Zeitentwicklung:  $\phi_\alpha(t) = \exp(-\frac{|\alpha|^2 + i\omega t}{2}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} \psi_n$

BEW:  $\phi_\alpha(t) = \exp(-\frac{|\alpha|^2}{2}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(t)$  mit  $\psi_n(t) = \psi_n \exp(-i \frac{\varepsilon_n}{\hbar} t) = \psi_n e^{-i\omega t n} e^{-i\omega t/2}$

6.12)  $\phi_\alpha(t)$  ist Eigenzustand des Vernichtungsoperators  $a$  zum Eigenwert  $\alpha(t) = \alpha e^{-i\omega t}$ :

BEW:  $a \phi_\alpha(t) = \exp(-\frac{|\alpha|^2 + i\omega t}{2}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha(t)^n}{\sqrt{n!}} a \psi_n \stackrel{(6.10)}{=} \exp(-\frac{|\alpha|^2 + i\omega t}{2}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha(t)^n}{\sqrt{n!}} \sqrt{n} \psi_{n-1}$   
 $= \alpha(t) \exp(-\frac{|\alpha|^2 + i\omega t}{2}) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha(t)^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}} \psi_{n-1} = \alpha(t) \phi_\alpha(t)$

6.13)  Die quasi-klassischen Zustände sind fast orthonormal:  $|\langle \phi_\alpha | \phi_\beta \rangle|^2 = \exp(-|\alpha - \beta|^2)$

6.14) Wahrscheinlichkeit im Zustand  $\phi_\alpha(t)$  genau  $n$  Oszillator-Quanten zu finden:

$$\langle \psi_m | \phi_\alpha(t) \rangle \stackrel{(6.11)}{=} \exp\left(-\frac{|\alpha|^2 + i\omega t}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2 + i\omega t}{2}\right) \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^m}{\sqrt{m!}}$$

$$P_\alpha(n) \equiv |\langle \phi_\alpha(t) | \psi_n \rangle|^2 = \exp(-|\alpha|^2) \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \rightarrow \text{Poisson Verteilung}$$

6.15) Mittlere Anzahl von Oszillator-Quanten im Zustand  $\phi_\alpha(t)$ :  $\langle N \rangle_\alpha = |\alpha|^2$

$$\begin{aligned} \langle N \rangle_\alpha &= \langle \phi_\alpha(t) | N | \phi_\alpha(t) \rangle = \langle \phi_\alpha(t) | a^\dagger a | \phi_\alpha(t) \rangle = \langle a | \phi_\alpha(t) | a | \phi_\alpha(t) \rangle \stackrel{(6.12)}{=} \langle \alpha(t) | \phi_\alpha(t) | \alpha(t) | \phi_\alpha(t) \rangle \\ &= |\alpha|^2 \langle \phi_\alpha(t) | \phi_\alpha(t) \rangle = |\alpha|^2 \end{aligned}$$

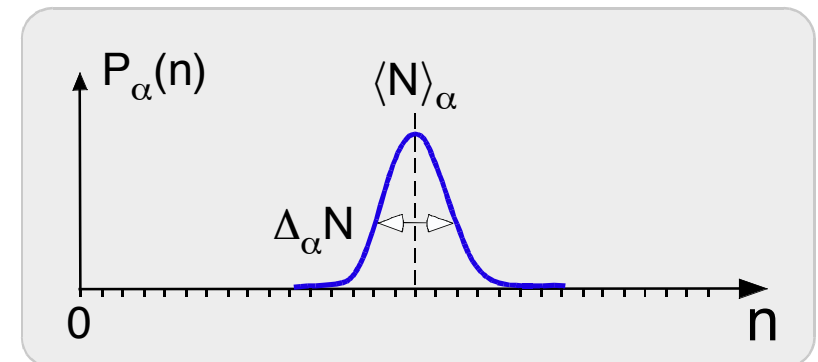
6.16) Unschärfe der Anzahl von Oszillator-Quanten im Zustand  $\phi_\alpha(t)$ :  $\Delta_\alpha N = \sqrt{\langle N \rangle_\alpha}$

$$N^2 = a^\dagger \overset{1 + a^\dagger a}{a a^\dagger} a \stackrel{(6.3)}{=} a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger a a$$

$$\langle N^2 \rangle_\alpha = \langle \phi_\alpha(t) | N^2 | \phi_\alpha(t) \rangle = \langle a \phi_\alpha(t) | a | \phi_\alpha(t) \rangle + \langle a^2 \phi_\alpha(t) | a^2 | \phi_\alpha(t) \rangle \stackrel{(6.12)}{=} |\alpha|^2 + |\alpha|^4$$

$$\langle N \rangle_\alpha^2 \stackrel{(6.15)}{=} |\alpha|^4$$

$$\Delta_\alpha N = \sqrt{\langle N^2 \rangle_\alpha - \langle N \rangle_\alpha^2} = |\alpha| \stackrel{(6.15)}{=} \sqrt{\langle N \rangle_\alpha}$$



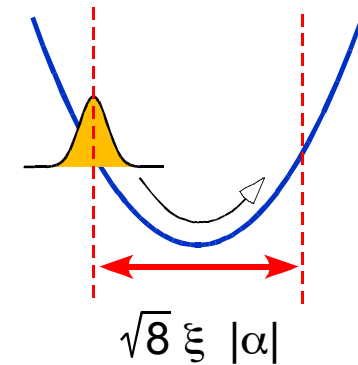
Erwartungswerte und Varianzen von X und P im Zustand  $\phi_\alpha(t)$ ,  $\alpha = |\alpha| e^{i\theta}$ :

a.  $\langle X \rangle_\alpha = \sqrt{2} \xi |\alpha| \cos(\omega t - \theta)$  Schwingung mit Frequenz  $\omega$

b.  $\langle P \rangle_\alpha = m \frac{\partial}{\partial t} \langle X \rangle_\alpha$

c.  $\Delta_\alpha X = \frac{\xi}{\sqrt{2}}$ ,  $\Delta_\alpha P = \frac{\hbar}{\sqrt{2} \xi}$  hängt nicht von Amplitude  $\alpha$  ab

d.  $\Delta_\alpha X \Delta_\alpha P = \hbar/2 \rightarrow$  minimales Unschärfe-Produkt



BEW:

a.  $\langle X \rangle_\alpha = \langle \phi_\alpha(t) | X | \phi_\alpha(t) \rangle \stackrel{(6.2)}{=} \frac{\xi}{\sqrt{2}} \langle \phi_\alpha(t) | (a^\dagger + a) | \phi_\alpha(t) \rangle = \frac{\xi}{\sqrt{2}} \left( \langle a | \phi_\alpha(t) \rangle \langle \phi_\alpha(t) | + \langle \phi_\alpha(t) | a | \phi_\alpha(t) \rangle \right)$   
 $\stackrel{(6.12)}{=} \frac{\xi}{\sqrt{2}} \left( \langle \alpha(t) | \phi_\alpha(t) \rangle \langle \phi_\alpha(t) | + \langle \phi_\alpha(t) | \alpha(t) \rangle \langle \phi_\alpha(t) | \right) = \frac{\xi}{\sqrt{2}} (\alpha^*(t) + \alpha(t)) = \frac{\xi}{\sqrt{2}} (\alpha^* e^{i\omega t} + \alpha e^{-i\omega t})$

$= \sqrt{2} \xi |\alpha| \cos(\omega t - \theta)$  mit  $\alpha = |\alpha| e^{i\theta}$   $\alpha = |\alpha| e^{i\theta}$  beschreibt die maximale Amplitude  $|\alpha|$  und die Phasenlage  $\theta$  der Oszillation.

b.  $\langle P \rangle_\alpha = \langle \phi_\alpha(t) | P | \phi_\alpha(t) \rangle \stackrel{(6.2)}{=} i\hbar/(2^{1/2}\xi) \langle \phi_\alpha(t) | (a^\dagger - a) | \phi_\alpha(t) \rangle \stackrel{(6.12)}{=} i\hbar/(2^{1/2}\xi) (\alpha^*(t) - \alpha(t))$   
 $= i\hbar/(2^{1/2}\xi) (\alpha^* e^{i\omega t} - \alpha e^{-i\omega t}) = -2^{1/2} \xi m \omega |\alpha| \sin(\omega t - \theta) = m \frac{\partial}{\partial t} \langle X \rangle_\alpha$

c.  $\langle X^2 \rangle_\alpha \stackrel{(6.2)}{=} (\xi^2/2) \langle a^+ a^+ + a a + \overset{1+a^+a}{\boxed{a a^+}} + a^+ a \rangle_\alpha \stackrel{(6.3)}{=} (\xi^2/2) \langle \phi_\alpha(t) | a^+ a^+ + a a + 2 a^+ a + 1 | \phi_\alpha(t) \rangle$

$$\stackrel{(6.12)}{=} (\xi^2/2) (\alpha^*(t)^2 + \alpha(t)^2 + 2|\alpha|^2 + 1)$$

use (6.2):  $X = \frac{\xi}{\sqrt{2}} (a^+ + a)$

$$\langle X \rangle_\alpha \stackrel{a.}{=} (\xi^2/2) (\alpha^*(t) + \alpha(t))^2 = (\xi^2/2) (\alpha^*(t)^2 + \alpha(t)^2 + 2|\alpha|^2)$$

$\Rightarrow \Delta_\alpha X^2 = \langle X^2 \rangle_\alpha - \langle X \rangle_\alpha^2 = (\xi^2/2)$  hängt nicht von  $\alpha$  ab, entspricht Grundzustandsvarianz.

$\langle P^2 \rangle_\alpha \stackrel{(6.2)}{=} (-\hbar^2/2\xi^2) \langle a^+ a^+ + a a - \overset{1+a^+a}{\boxed{a a^+}} - a^+ a \rangle_\alpha \stackrel{(6.3)}{=} -\hbar^2/(2\xi^2) \langle \phi_\alpha(t) | a^+ a^+ + a a - 2 a^+ a - 1 | \phi_\alpha(t) \rangle$

$$\stackrel{(6.12)}{=} -\hbar^2/(2\xi^2) (\alpha^*(t)^2 + \alpha(t)^2 - 2|\alpha|^2 - 1)$$

use (6.2):  $P = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}\xi} (a^+ - a)$

$$\langle P \rangle_\alpha \stackrel{a.}{=} -\hbar^2/(2\xi^2) (\alpha^*(t) - \alpha(t))^2 = -\hbar^2/(2\xi^2) (\alpha^*(t)^2 + \alpha(t)^2 - 2|\alpha|^2)$$

$\Rightarrow \Delta_\alpha P^2 = \langle P^2 \rangle_\alpha - \langle P \rangle_\alpha^2 = \hbar^2/(2\xi^2)$  hängt nicht von  $\alpha$  ab, entspricht Grundzustandsvarianz.

d. folgt mit c.



# BSP: Monochromatisches Lichtfeld als harmonischer Oszillator



Klassisches monochromatisches Lichtfeld:  $E(r,t) = i \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0}} \left[ \hat{\varepsilon}(r) \alpha(t) - \hat{\varepsilon}(r)^* \alpha^*(t) \right]$

Amplitude:  $\alpha(t) = \alpha(0) e^{-i\omega t}$  ist harmonischer Oszillator

$\hat{\varepsilon}(r)$  = räumliche Struktur bzw. Polarisation der Feldverteilung:  $1 = \int \hat{\varepsilon}(r) \hat{\varepsilon}^*(r) d^3r$   
(Bsp: ebene Welle  $\hat{\varepsilon}_0 e^{ikr}$  mit konstanter Polarisation)

Maxwell-Gleichung:  $\frac{\partial}{\partial t} E(r,t) = c^2 \nabla \times B(r,t)$ ,  $\frac{\partial}{\partial t} B(r,t) = - \nabla \times E(r,t)$ ,  $0 = \nabla E(r,t) = \nabla B(r,t)$

$\rightarrow c^{-2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} E(r,t) = - \nabla \times (\nabla \times E) = \Delta E \rightarrow \left[ \Delta + \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 \right] \hat{\varepsilon}(r) = 0$  Helmholtz-Gleichung

Magnetische Induktion:  $B(r,t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega\varepsilon_0}} \left[ \nabla \times \hat{\varepsilon}(r) \alpha(t) + \nabla \times \hat{\varepsilon}(r)^* \alpha^*(t) \right]$

Energie:  $H = \frac{\varepsilon_0}{2} \int E(r,t)^2 d^3r + \frac{1}{2\mu_0} \int B(r,t)^2 d^3r = \hbar\omega \alpha(t)^* \alpha(t)$

Quantisierung:  $H = \hbar\omega \alpha^* \alpha = \hbar\omega \frac{1}{2} \{ \alpha^* \alpha + \alpha \alpha^* \}$



$$\alpha \rightarrow a, \alpha^* \rightarrow a^+, [a, a^+] = 1$$

Hamilton-Operator:  $H = \hbar\omega (a^+ a + \frac{1}{2})$

Zähl-Operator:  $N = a^+ a$  zählt die in der Mode  $\hat{\epsilon}(r)$  vorhandenen Photonen

E-Feld-Operator:  $E = i \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0}} [ \hat{\epsilon}(r) a - \hat{\epsilon}^*(r) a^+ ]$

B-Feld-Operator:  $B = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega\epsilon_0}} [ \nabla \times \hat{\epsilon}(r) a + \nabla \times \hat{\epsilon}(r)^* a^+ ]$

$$P = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}\xi} (a^+ - a)$$

$$X = \frac{\xi}{\sqrt{2}} (a^+ + a)$$

beim mechanischen Oszillator

Fock-Zustände (Eigenzustände von  $H$ ):

Man bezeichnet den Grundzustand durch  $|0\rangle$  (Vakuum) mit  $N|0\rangle = 0$  (enthält keine Photonen)

$$|n\rangle \equiv \frac{a^{+n}}{\sqrt{n!}} |0\rangle \Rightarrow a|n\rangle = n^{1/2} |n-1\rangle, a^+|n\rangle = (n+1)^{1/2} |n+1\rangle$$

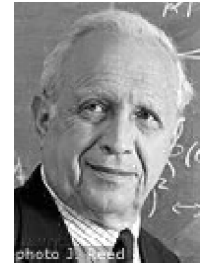
$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}, N|n\rangle = n|n\rangle$$

E-Feld-Operator:  $\langle n|E|n\rangle = 0 \rightarrow$  kein mittleres elektrisches Feld im Fock-Zustand

$$(\Delta_n E)^2 = \langle n|E^2|n\rangle = \frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0} \hat{\epsilon}(r) \hat{\epsilon}^*(r) (2n+1) \neq 0 \text{ sogar für } n = 0 !$$

$$(\Delta_0 E^2 = \langle 0|E^2|0\rangle \neq 0 \rightarrow \text{Vakuum-Fluktuationen})$$

# Kohärente Zustände (Eigenzustände von $a$ ):



Roy Glauber (1962)  
Nobelpreis 2005

$$\forall \alpha \in \mathbb{C} : |\alpha\rangle \equiv \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

Mittleres elektrisches Feld:  $\langle \alpha | E | \alpha \rangle = i \sqrt{\frac{\hbar \omega}{2 \epsilon_0}} [\hat{\epsilon}(x) \alpha - \hat{\epsilon}^*(x) \alpha^*]$

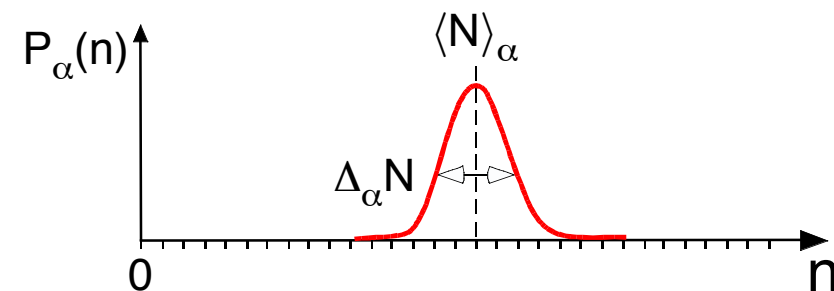
Varianz des elektrischen Felds:  $\Delta_\alpha E \equiv \sqrt{\langle \alpha | E^2 | \alpha \rangle - \langle \alpha | E | \alpha \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar \omega}{2 \epsilon_0}} |\hat{\epsilon}(x)|$

unabhängig von Feldamplitude  $\alpha$

Wahrscheinlichkeit im Zustand  $|\alpha\rangle$  genau  $n$  Photonen zu finden:

$$P_\alpha(n) \equiv |\langle \alpha | n \rangle|^2 = \exp(-|\alpha|^2) \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}$$

→ Poisson Verteilung



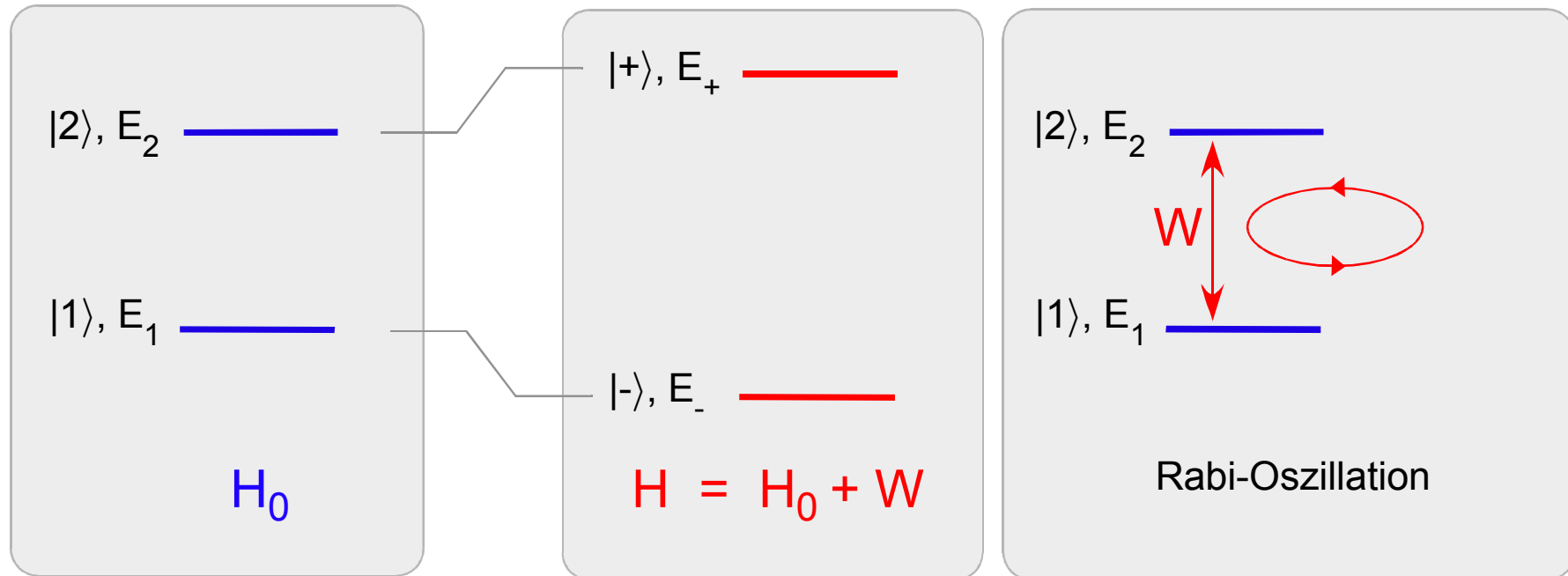
Mittlere Photonenzahl im Zustand  $|\alpha\rangle$ :  $\langle N \rangle_\alpha = \langle \alpha | N | \alpha \rangle = |\alpha|^2$

Unschärfe der Photonenzahl im Zustand  $|\alpha\rangle$ :  $\Delta_\alpha N^2 \equiv \langle N^2 \rangle_\alpha - \langle N \rangle_\alpha^2 = |\alpha|^2$

⇒  $\Delta_\alpha N = \sqrt{\langle N \rangle_\alpha} = |\alpha|$  → Quantenrauschen des Lasers (Schrotrauschen)

# Das Zwei-Niveau-System: ein Paradigma der Quantenmechanik

BSP: Spektrallinien in Atomen und Molekülen, Spin-Resonanzen (Kern-Spin-Tomographie) etc.



Im ungestörten System mit Hamilton-Operators  $H_0$  seien  $|1\rangle$  und  $|2\rangle$  stationär mit scharfen Energien  $E_1$  und  $E_2$ .

Im System  $H$  gibt es neue Eigenzustände  $|+\rangle, |-\rangle$  mit modifizierten Energiewerten  $E_+$  und  $E_-$  (**Energieverschiebung**). Die Zustände  $|1\rangle$  und  $|2\rangle$  sind nicht mehr stationär. Präpariert man das System zur Zeit  $t$  in  $|1\rangle$  oder  $|2\rangle$  so beginnt eine **Rabi**-Oszillation zwischen beiden Zuständen.

# Zwei-Niveau-System: ein Model für stimulierte Emission und Absorption

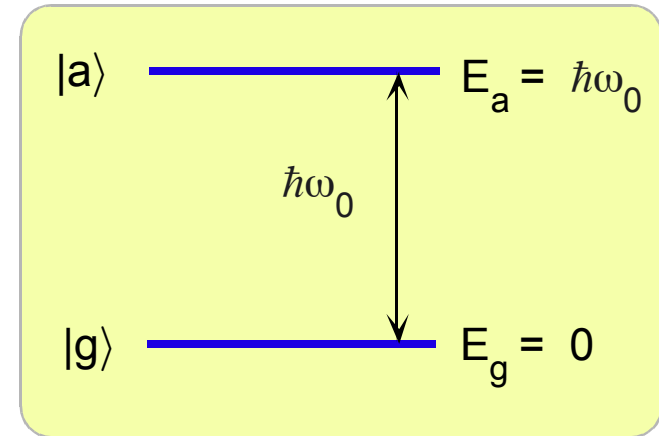
Betrachtung eines Quantensystems mit zwei diskreten Energie-Niveaus  $|g\rangle$  und  $|a\rangle$ :



Hamilton-Operator:  $\mathbf{H}_A = \hbar\omega_0 |a\rangle\langle a|$  (6.17)

$$\Rightarrow \begin{aligned} \mathbf{H}_A |g\rangle &= 0 \\ \mathbf{H}_A |a\rangle &= \hbar\omega_0 |a\rangle \end{aligned}$$

$$\hbar\omega_0 \neq 0 \Rightarrow \text{EW verschieden} \Rightarrow \langle a|g\rangle = 0 \Rightarrow |g\rangle\langle g| + |a\rangle\langle a| = 1$$



Matrixelemente in Basis  $\{|g\rangle, |a\rangle\}$ :  $\langle n| \mathbf{H}_A |m\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \hbar\omega_0 \end{pmatrix}$

Schrödinger Gleichung:  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \mathbf{H}_A |\psi\rangle \Rightarrow \begin{aligned} |g(t)\rangle &= |g\rangle \\ |a(t)\rangle &= |a\rangle e^{-i\omega_0 t} \end{aligned}$

Alle linearen Überlagerungen  $\alpha |g(t)\rangle + \beta |a(t)\rangle$  sind Lösungen

# Zwei-Niveau-Atom mit Wechselwirkung



Dipolmoment:  $\mathbf{d} = \mu |g\rangle\langle a| + \mu^* |a\rangle\langle g|$  mit  $\mu \equiv \langle g| \mathbf{d} |a\rangle$

$$\Rightarrow \begin{aligned} \langle g| \mathbf{d} |g\rangle &= \langle a| \mathbf{d} |a\rangle = 0 \\ \langle g| \mathbf{d} |a\rangle &= \langle a| \mathbf{d} |g\rangle^* = \mu \end{aligned}$$

Erwartungswert = 0 für  $\{|g\rangle, |a\rangle\}$   
kein permanentes Dipolmoment

Matrixelemente in Basis  $\{|g\rangle, |a\rangle\}$ :

$$\langle n| \mathbf{d} |m\rangle = \begin{pmatrix} 0 & \mu \\ \mu^* & 0 \end{pmatrix}$$

Wechselwirkung:  $\mathbf{W} = \mathbf{d} E(t)$ ,  $E(t) = E_0 e^{-i\omega t} + E_0^* e^{i\omega t}$  elektrisches Feld

Matrixelemente in Basis  $\{|g\rangle, |a\rangle\}$ :

$$\langle n| \mathbf{W} |m\rangle = \begin{pmatrix} 0 & \mu E(t) \\ \mu^* E(t) & 0 \end{pmatrix}$$

Schrödinger-Gleichung mit Wechselwirkung in Basis  $\{|g\rangle, |a\rangle\}$ :  $|\psi\rangle = \gamma(t) |g\rangle + \alpha(t) |a\rangle$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = (\mathbf{H}_A + \mathbf{W}) |\psi\rangle \quad \Leftrightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \gamma(t) \\ \alpha(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \mu E(t) \\ \mu^* E(t) & \hbar\omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma(t) \\ \alpha(t) \end{pmatrix}$$

Matrix ist zeitabhängig  $\rightarrow$  Lösung einfacher in einer mitrotierenden Basis !



Transformation in eine mitrotierende Basis  $\{|g\rangle, |a\rangle\} \rightarrow \{|g\rangle, |b\rangle \equiv |a\rangle e^{-i(\omega t + \theta)}\}$

$$\dot{|b\rangle} = -i\omega |b\rangle \quad (*)$$

$$|\psi\rangle = \gamma(t) |g\rangle + \beta(t) |b\rangle, \quad \gamma(t) = \langle g|\psi\rangle, \quad \beta(t) = \langle b|\psi\rangle \quad (**)$$

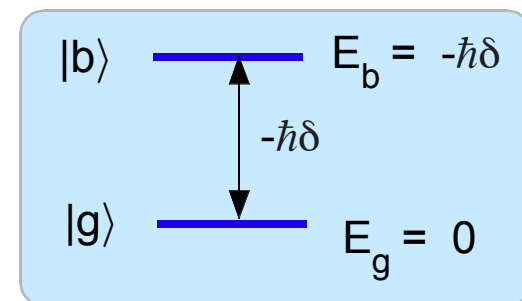
$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\gamma(t) |g\rangle + \beta(t) |b\rangle) = i\hbar (\dot{\gamma}(t) |g\rangle + \dot{\beta}(t) |b\rangle) + i\hbar \beta(t) \dot{|b\rangle} \\ &\stackrel{(*)}{=} i\hbar (\dot{\gamma}(t) |g\rangle + \dot{\beta}(t) |b\rangle) + \hbar\omega \beta(t) |b\rangle \quad (***) \end{aligned}$$

Schrödinger-Gleichung ohne Wechselwirkung in mitrotierender Basis  $R \equiv \{|g\rangle, |b\rangle\}$ :

$$\begin{aligned} i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial t} \right)_R |\psi\rangle &\stackrel{(***)}{=} i\hbar (\dot{\gamma}(t) |g\rangle + \dot{\beta}(t) |b\rangle) \stackrel{(**)}{=} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle - \hbar\omega \beta(t) |b\rangle \stackrel{(**)}{=} \mathbf{H}_A |\psi\rangle - \hbar\omega |b\rangle \langle b|\psi\rangle \\ &\stackrel{(6.17)}{=} \hbar\omega_0 |a\rangle \langle a|\psi\rangle - \hbar\omega |b\rangle \langle b|\psi\rangle = \hbar\omega_0 |b\rangle \langle b|\psi\rangle - \hbar\omega |b\rangle \langle b|\psi\rangle \\ &= \mathbf{H}_B |\psi\rangle, \quad \text{mit } \mathbf{H}_B \equiv -\hbar\delta |b\rangle \langle b|, \quad \delta \equiv \omega - \omega_0 \end{aligned}$$

SGL in mitrotierender Basis lautet:

$$i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial t} \right)_R |\psi\rangle = \mathbf{H}_B |\psi\rangle \quad \Leftrightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \gamma(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\hbar\delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix}$$





Dipolmoment in Basis  $\{|g\rangle, |b\rangle\}$ :

verwende

$$|b\rangle \equiv |a\rangle e^{-i(\omega t + \theta)}$$

$$\langle g | \mathbf{d} | g \rangle = \langle a | \mathbf{d} | a \rangle = 0, \langle g | \mathbf{d} | a \rangle = \mu$$

$$\langle g | \mathbf{d} | g \rangle = 0, \langle b | \mathbf{d} | b \rangle = \langle a | \mathbf{d} | a \rangle = 0$$

$$\langle g | \mathbf{d} | b \rangle = \langle g | \mathbf{d} | a \rangle e^{-i(\omega t + \theta)} = \mu e^{-i(\omega t + \theta)}$$

$$\langle b | \mathbf{d} | g \rangle = \langle g | \mathbf{d} | a \rangle^* e^{i(\omega t + \theta)} = \mu^* e^{i(\omega t + \theta)}$$

Matrixelemente von  $\mathbf{d}$  in  
mitrotierender Basis  $\{|g\rangle, |b\rangle\}$ :

$$\langle n | \mathbf{d} | m \rangle = \begin{pmatrix} 0 & \mu e^{-i(\omega t + \theta)} \\ \mu^* e^{i(\omega t + \theta)} & 0 \end{pmatrix}$$

Wechselwirkung in Basis  $\{|g\rangle, |b\rangle\}$ :

$$\langle n | \mathbf{W} | m \rangle = \langle n | \mathbf{d} | m \rangle E(t) = \begin{pmatrix} 0 & \mu E(t) e^{-i(\omega t + \theta)} \\ \mu^* E(t) e^{i(\omega t + \theta)} & 0 \end{pmatrix}, \quad E(t) = E_0 e^{-i\omega t} + E_0^* e^{i\omega t}$$

Drehwellen-Näherung:

Schnell oszillierender Term wird vernachlässigt !

$$\mu^* E(t) e^{i(\omega t + \theta)} = \mu^* E_0 e^{i\theta} + \mu^* E_0^* e^{i(2\omega t + \theta)} \approx \mu^* E_0 e^{i\theta} = \hbar \omega_R / 2 \geq 0 \text{ reell}$$

! (Wähle  $\theta$  geeignet)

Rabi-Frequenz  
(Stärke der Wechselwirkung)

$$\Rightarrow \langle n | \mathbf{W} | m \rangle \approx \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \omega_R \\ \omega_R & 0 \end{pmatrix}$$



## Lösung der Schrödinger-Gleichung in der Basis $\{|g\rangle, |b\rangle\}$ :



$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_B + \mathbf{W}, \quad \langle n | \mathbf{H} | m \rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \omega_R \\ \omega_R & -2\delta \end{pmatrix}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \mathbf{H} |\psi(t)\rangle \quad \Leftrightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \gamma(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \omega_R \\ \omega_R & -2\delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix}$$

$$|\psi\rangle = \gamma(t) |g\rangle + \beta(t) |b\rangle$$

$$E |\phi\rangle = \mathbf{H} |\phi\rangle \quad \Leftrightarrow \quad E \begin{pmatrix} \gamma_0 \\ \beta_0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \omega_R \\ \omega_R & -2\delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_0 \\ \beta_0 \end{pmatrix}$$

$$|\phi\rangle = \gamma_0 |g\rangle + \beta_0 |b\rangle$$

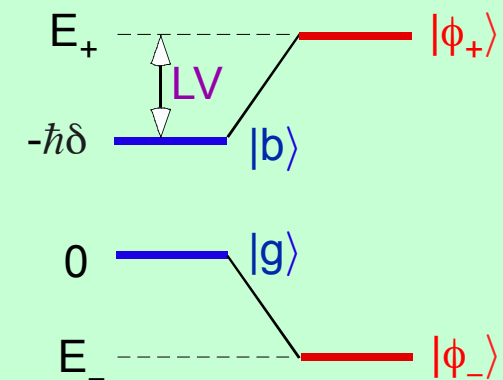
**Ü1** Eigenzustände und Eigenwerte:  $\mathbf{H} |\phi_{\pm}\rangle = E_{\pm} |\phi_{\pm}\rangle$

$$E_{\pm} = \frac{-\hbar\delta}{2} \left( 1 \pm \frac{\Omega}{\delta} \right), \quad \Omega \equiv \sqrt{\delta^2 + \omega_R^2}$$

$$\begin{pmatrix} |\phi_+\rangle \\ |\phi_-\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin(\xi) & \cos(\xi) \\ \cos(\xi) & \sin(\xi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |g\rangle \\ |b\rangle \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \xi \equiv \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{\omega_R}{\delta}\right)$$

LV = Lichtverschiebung bzw. dynamische Stark-Verschiebung

Skizze für negative Verstimmung  $\delta$



Allgemeine Lösungen der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung (siehe Seite 5.24):



$$|\psi(t)\rangle = A_+ |\phi_+\rangle \exp(-i \frac{E_+}{\hbar} t) + A_- |\phi_-\rangle \exp(-i \frac{E_-}{\hbar} t)$$

$A_{\pm}$  beliebige komplexe Zahlen mit  $|A_+|^2 + |A_-|^2 = 1$

**Ü2** Spezielle Lösung  $|\psi(t)\rangle = \gamma(t) |g\rangle + \beta(t) |b\rangle$  mit Anfangsbedingung  $|\psi(0)\rangle = |g\rangle$

$$\begin{pmatrix} \gamma(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} = \frac{\exp(i\delta t / 2)}{\Omega} \begin{pmatrix} -\Omega \cos(\Omega t / 2) - i \delta \sin(\Omega t / 2) \\ i\omega_R \sin(\Omega t / 2) \end{pmatrix}, \quad \Omega \equiv \sqrt{\delta^2 + \omega_R^2} \quad (6.18)$$

Besetzung von  $|b\rangle$  :  $|\beta(t)|^2 = \frac{\omega_R^2}{\delta^2 + \omega_R^2} \sin^2(\Omega t / 2)$

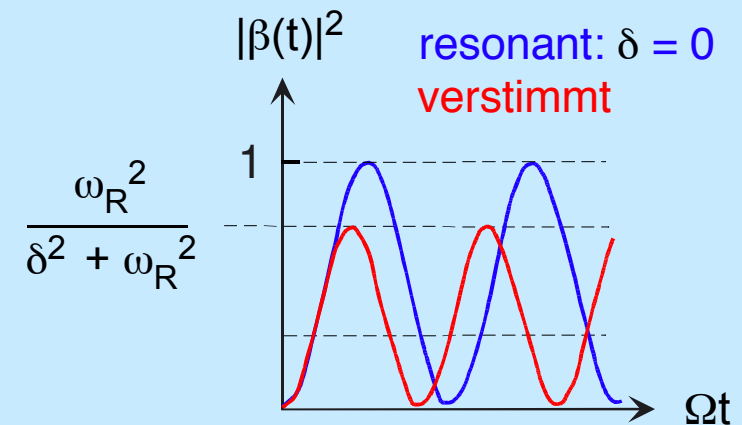
Besetzung von  $|g\rangle$  :  $|\gamma(t)|^2 = 1 - |\beta(t)|^2$

Das System oszilliert zwischen den Niveaus

$|g\rangle$  und  $|b\rangle$  mit der verallgemeinerten Rabi-Frequenz  $\Omega$

→ stimulierte Absorption und Emission

### Rabi-Oszillation:



## Ü1 Bestimmung der Eigenvektoren und Eigenwerte

Das charakteristische Polynom für die Matrix  $\begin{pmatrix} 0 & \omega_R \\ \omega_R & -2\delta \end{pmatrix}$  ist  $x^2 + 2\delta x - \omega_R^2 = 0$  mit den Nullstellen  $x = -\delta \pm \sqrt{\omega_R^2 + \delta^2} = -\delta \left(1 \pm \frac{\Omega}{\delta}\right)$

Die Eigenwerte von H sind somit  $E_{\pm} = -\frac{\hbar\delta}{2} \left(1 \pm \frac{\Omega}{\delta}\right) = -\frac{\hbar\delta}{2} \mp \frac{\hbar\Omega}{2}$

Ansatz für Eigenvektoren  $|\phi_+\rangle = -\sin(\theta)|g\rangle + \cos(\theta)|b\rangle$ ,  $|\phi_-\rangle = \cos(\theta)|g\rangle + \sin(\theta)|b\rangle$  führt zu Eigenwertgleichungen

$$\begin{pmatrix} 0 & \omega_R \\ \omega_R & -2\delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sin(\theta) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix} = -\delta \left(1 + \frac{\Omega}{\delta}\right) \begin{pmatrix} -\sin(\theta) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & \omega_R \\ \omega_R & -2\delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\theta) \\ \sin(\theta) \end{pmatrix} = -\delta \left(1 - \frac{\Omega}{\delta}\right) \begin{pmatrix} \cos(\theta) \\ \sin(\theta) \end{pmatrix}$$

und somit zu  $\omega_R \cos(\theta) = \delta \left(1 + \frac{\Omega}{\delta}\right) \sin(\theta)$  und weiter  $\tan(\theta) = \frac{\omega_R}{\delta + \Omega}$

$$\tan(2\theta) = \frac{2\tan(\theta)}{1 - \tan^2(\theta)} = \frac{2 \frac{\omega_R}{\delta + \Omega}}{1 - \left(\frac{\omega_R}{\delta + \Omega}\right)^2} = \frac{2\omega_R(\delta + \Omega)}{(\delta + \Omega)^2 - \omega_R^2} = \frac{2\omega_R(\delta + \Omega)}{2\delta^2 + 2\delta\Omega} = \frac{\omega_R}{\delta}, \quad \frac{\omega_R}{\delta} = \frac{2\tan(\theta)}{1 - \tan^2(\theta)} = \frac{2\sin(\theta)\cos(\theta)}{\cos^2(\theta) - \sin^2(\theta)}$$

Es folgt 
$$\left(\frac{\omega_R}{\Omega}\right)^2 = \frac{\left(\frac{\omega_R}{\delta}\right)^2}{1 + \left(\frac{\omega_R}{\delta}\right)^2} = \frac{4\sin^2(\theta)\cos^2(\theta)}{(\sin^2(\theta) - \cos^2(\theta))^2 + 4\sin^2(\theta)\cos^2(\theta)} = \frac{4\sin^2(\theta)\cos^2(\theta)}{(\sin^2(\theta) + \cos^2(\theta))^2} = 4\sin^2(\theta)\cos^2(\theta)$$

$$\Rightarrow \frac{\omega_R}{\Omega} = 2\sin(\theta)\cos(\theta), \quad \frac{\delta}{\Omega} = \sin^2(\theta) - \cos^2(\theta), \quad \frac{\omega_R}{\delta} = \tan(2\theta), \quad \frac{\Omega + \delta}{2\Omega} = \cos^2(\theta), \quad \frac{\Omega - \delta}{2\Omega} = \sin^2(\theta), \quad \frac{\omega_R}{\Omega + \delta} = \tan(\theta)$$

## Ü2

### Lösung der Schrödinger-Gleichung für Anfangsbedingung $|\psi(t=0)\rangle = |g\rangle$

Allgemeine Lösung lautet

$$|\psi(t)\rangle = |\phi_+\rangle A_+ e^{-i\frac{E_+}{\hbar}t} + |\phi_-\rangle A_- e^{-i\frac{E_-}{\hbar}t} = |g\rangle e^{i\frac{\delta}{2}t} \left[ -\sin(\theta) A_+ e^{i\frac{\Omega}{2}t} + \cos(\theta) A_- e^{-i\frac{\Omega}{2}t} \right] + |b\rangle e^{i\frac{\delta}{2}t} \left[ \cos(\theta) A_+ e^{i\frac{\Omega}{2}t} + \sin(\theta) A_- e^{-i\frac{\Omega}{2}t} \right]$$

Einsetzen von  $E_{\pm}, |\phi_{\pm}\rangle$

Anfangsbedingung erfordert

$$|\psi(t=0)\rangle = |g\rangle \Rightarrow 0 = [\cos(\theta) A_+ + \sin(\theta) A_-] \Rightarrow A_+ = \sin(\theta), A_- = -\cos(\theta)$$

und somit

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= |g\rangle e^{i\frac{\delta}{2}t} \left[ -\sin^2(\theta) e^{i\frac{\Omega}{2}t} - \cos^2(\theta) e^{-i\frac{\Omega}{2}t} \right] + |b\rangle e^{i\frac{\delta}{2}t} \sin(\theta)\cos(\theta) \left[ e^{i\frac{\Omega}{2}t} - e^{-i\frac{\Omega}{2}t} \right] \\ &= |g\rangle e^{i\frac{\delta}{2}t} \left[ -\cos\left(\frac{\Omega}{2}t\right) - i(\sin^2(\theta) - \cos^2(\theta)) \sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right) \right] + |b\rangle e^{i\frac{\delta}{2}t} 2\sin(\theta)\cos(\theta) i \sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right) \\ &= |g\rangle e^{i\frac{\delta}{2}t} \left[ -\cos\left(\frac{\Omega}{2}t\right) - i \frac{\delta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right) \right] + |b\rangle e^{i\frac{\delta}{2}t} \frac{\omega_R}{\Omega} i \sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right) \Rightarrow \begin{pmatrix} \gamma(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} = \frac{\exp(i\delta t/2)}{\Omega} \begin{pmatrix} -\Omega \cos(\Omega t/2) - i\delta \sin(\Omega t/2) \\ i\omega_R \sin(\Omega t/2) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Es folgt

$$|\langle g|\psi(t)\rangle|^2 = \cos^2\left(\frac{\Omega}{2}t\right) + \left(\frac{\delta}{\Omega}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\Omega}{2}t\right), \quad |\langle b|\psi(t)\rangle|^2 = \left(\frac{\omega_R}{\Omega}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\Omega}{2}t\right)$$

# 7. Bahn-Drehimpuls

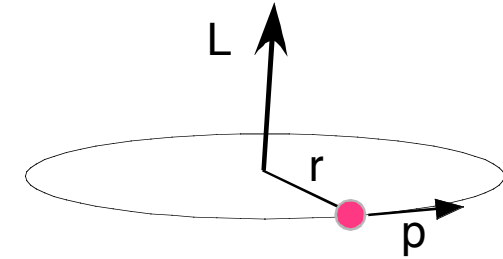
## Bahn-Drehimpuls:

klassisch:  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$

$$L_x = y p_z - z p_y$$

$$L_y = z p_x - x p_z$$

$$L_z = x p_y - y p_x$$



quantenmechanisch:  $[R_\nu, P_\mu] = i\hbar \delta_{\nu\mu}$  i.e., verschiedene Komponenten von Orts- und Impuls-Operatoren vertauschen  $\Rightarrow$  eindeutige Quantisierungsvorschrift  
 $r_\nu \rightarrow R_\nu, p_\nu \rightarrow P_\nu \quad \Rightarrow \quad \mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$

Mit  $R_\nu, P_\mu$  sind auch  $L_\mu$  selbstadjungiert:

$$L_x^+ = (Y P_z)^+ - (Z P_y)^+ = P_z^+ Y^+ - P_y^+ Z^+ = P_z Y - P_y Z = Y P_z - Z P_y$$

Vertauschungsrelationen:

$$(I) \quad [L_\nu, L_\mu] = i\hbar \varepsilon_{\nu\mu\kappa} L_\kappa \quad (7.1a)$$

$$(II) \quad [L^2, L_\mu] = 0 \quad (7.1b)$$

$$\varepsilon_{\nu\mu\kappa} \equiv \text{Levi-Civita Symbol} = \begin{cases} 0 & \text{falls } \nu\mu\kappa \text{ nicht alle verschieden} \\ 1 & \text{falls } \nu\mu\kappa \text{ gerade Permutation von xyz} \\ -1 & \text{falls } \nu\mu\kappa \text{ ungerade Permutation von xyz} \end{cases}$$

BEW (I):

$$\begin{aligned}
 [L_x, L_y] &= [\overset{1}{Y} \overset{2}{P_z} - \overset{3}{Z} \overset{4}{P_y}, \overset{3}{Z} \overset{4}{P_x} - \overset{1}{X} \overset{2}{P_z}] \\
 &= [\overset{1}{Y} \overset{3}{P_z}, \overset{2}{Z} \overset{4}{P_x}] + [\overset{2}{Z} \overset{4}{P_y}, \overset{1}{X} \overset{2}{P_z}] - \cancel{[\overset{1}{Y} \overset{2}{P_z}, \overset{4}{X} \overset{2}{P_z}]} - \cancel{[\overset{3}{Z} \overset{4}{P_y}, \overset{3}{Z} \overset{4}{P_x}]} \\
 &= Y P_z Z P_x - Z P_x Y P_z + Z P_y X P_z - X P_z Z P_y \\
 &= Y \boxed{P_z} Z P_x - Y \boxed{Z P_z} P_x + X \boxed{Z P_z} P_y - X \boxed{P_z} Z P_y \\
 &= Y \boxed{[P_z, Z]} P_x + X \boxed{[Z, P_z]} P_y = -i\hbar Y P_x + i\hbar X P_y = i\hbar L_z
 \end{aligned}$$

BEW (I)  $\Rightarrow$  (II):

$$\begin{aligned}
 [L_y^2, L_x] &= L_y^2 L_x - L_x L_y^2 \overset{[L_y, L_x] = -i\hbar L_z}{=} L_y L_x L_y - i\hbar L_y L_z - L_x L_y^2 = \cancel{L_x L_y L_y} - i\hbar (L_y L_z + L_z L_y) - \cancel{L_x L_y^2} \\
 &= -i\hbar (L_y L_z + L_z L_y)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [L_z^2, L_x] &= L_z^2 L_x - L_x L_z^2 \overset{[L_z, L_x] = i\hbar L_y}{=} L_z L_x L_z + i\hbar L_z L_y - L_x L_z^2 = \cancel{L_x L_z L_z} + i\hbar (L_y L_z + L_z L_y) - \cancel{L_x L_z^2} \\
 &= i\hbar (L_y L_z + L_z L_y)
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow [L^2, L_x] = [L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, L_x] = [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x] = 0$$

# Eigenwerte und Eigenzustände von Drehimpuls-Operatoren:

BEH:

Für selbstadjungierte Operatoren  $L_v$ ,  $v \in \{x, y, z\}$ , die den Vertauschungsrelationen (I) genügen, gilt:

Mögliche Eigenwerte von  $L^2$  sind  $\hbar^2 \ell(\ell+1)$  mit  $\ell = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$  ganzzahlig oder halbzahlig

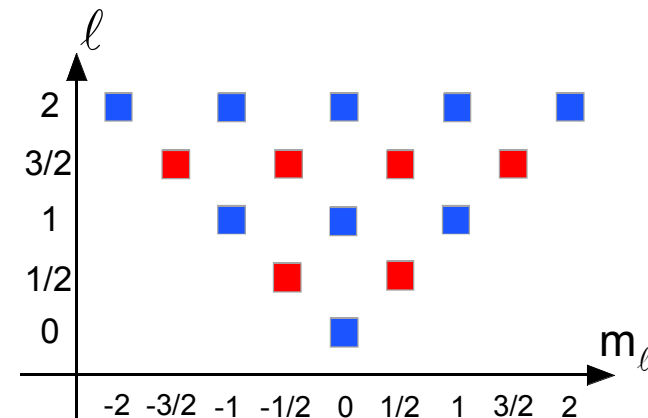
Für jeden Wert  $\ell$  gibt es  $2\ell+1$  gemeinsame Eigenzustände  $|\ell, m_\ell\rangle$  von  $L^2$  und  $L_z$

mit  $m \in \{-\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell\}$ , sodass

$$L^2 |\ell, m_\ell\rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1) |\ell, m_\ell\rangle$$

$$L_z |\ell, m_\ell\rangle = \hbar m |\ell, m_\ell\rangle$$

(7.2)



$\ell = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$  ganzzahlig oder halbzahlig

$m_\ell \in \{-\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell\}$



 **BEW:** wird in der theoretischen QM durchgeführt (siehe z.B. Cohen-Tannoudji, Quantum Mechanics I, Wiley)

Die Existenz eines gemeinsamen Systems von Eigenzuständen für  $L^2$ ,  $L_z$  folgt aus  $[L^2, L_z] = 0$ .

(Statt  $L^2$ ,  $L_z$  kann man auch andere Paarungen  $L^2$ ,  $L_\mu$  betrachten mit  $\mu \in \{x, y\}$ )

Die Eigenvektoren und Eigenwerte lassen sich mit Hilfe geschickt gewählter Leiteroperatoren rekursiv konstruieren ähnlich wie beim harmonischen Oszillator.

Leiter-Operatoren:  $L_\pm = L_x \pm i L_y \Rightarrow$

(a)  $L_+^\dagger = L_-$

(b)  $[L_z, L_\pm] = \pm \hbar L_\pm$

(c)  $L_- L_+ = L^2 - L_z^2 - \hbar L_z$

(d)  $L_+ L_- = L^2 - L_z^2 + \hbar L_z$

(e)  $[L^2, L_\pm] = 0$

(a)  $L_+^\dagger = (L_x + i L_y)^\dagger = L_x^\dagger - i L_y^\dagger = L_x - i L_y = L_-$

(b)  $[L_z, L_\pm] = L_z(L_x \pm i L_y) - (L_x \pm i L_y)L_z = L_z L_x \pm i L_z L_y - (L_x L_z \pm i L_y L_z)$   
 $= L_z L_x - L_x L_z \pm i (L_z L_y - L_y L_z) = i\hbar L_y \pm \hbar L_x = \pm \hbar (L_x \pm i L_y) = \pm \hbar L_\pm$   
(7.1a)

(c)  $L_- L_+ = (L_x - i L_y)(L_x + i L_y) = L_x^2 + L_y^2 + i (L_x L_y - L_y L_x) = L^2 - L_z^2 - \hbar L_z$   
(7.1a)

(e)  $[L^2, L_\pm] = [L^2, L_x] \pm i [L^2, L_y] = 0$   
(7.1b)

(I) Falls  $|\ell, m\rangle$  existiert mit  $L^2 |\ell, m\rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1) |\ell, m\rangle$ ,  $L_z |\ell, m\rangle = \hbar m |\ell, m\rangle$ ,  $0 \leq \ell$ , folgt:

$$0 \leq \langle \ell, m | L_- L_+ | \ell, m \rangle \stackrel{(c)}{=} \langle \ell, m | L^2 - L_z^2 - \hbar L_z | \ell, m \rangle = \hbar^2 (\ell - m)(\ell + 1 + m) = \hbar^2 [\ell(\ell + 1) - m(m + 1)]$$

$$0 \leq \langle \ell, m | L_+ L_- | \ell, m \rangle \stackrel{(d)}{=} \langle \ell, m | L^2 - L_z^2 + \hbar L_z | \ell, m \rangle = \hbar^2 (\ell + m)(\ell + 1 - m) = \hbar^2 [\ell(\ell + 1) - m(m - 1)]$$

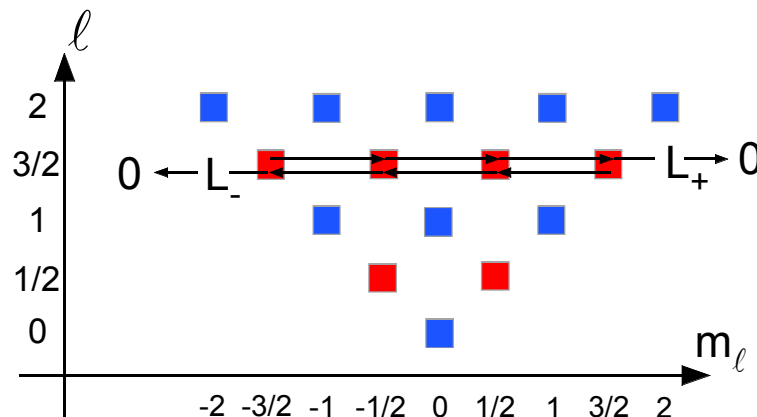
Es folgt  $m(m \pm 1) \leq \ell(\ell + 1)$  und somit  $-\ell \leq m \leq \ell$  (setze  $n \equiv -m \Rightarrow n \leq \ell$ )

(II) Falls  $|\ell, m\rangle$  existiert mit  $L^2 |\ell, m\rangle = \hbar^2 \ell(\ell + 1) |\ell, m\rangle$ ,  $L_z |\ell, m\rangle = \hbar m |\ell, m\rangle$  folgt:

$$L_z L_{\pm} |\ell, m\rangle \stackrel{(b)}{=} L_{\pm} L_z |\ell, m\rangle \pm \hbar L_{\pm} |\ell, m\rangle = \hbar (m \pm 1) L_{\pm} |\ell, m\rangle$$

$$L^2 L_{\pm} |\ell, m\rangle \stackrel{(e)}{=} L_{\pm} L^2 |\ell, m\rangle = \hbar^2 \ell(\ell + 1) L_{\pm} |\ell, m\rangle$$

Also ist für  $\pm m < \ell$  der Zustand  $|\ell, m \pm 1\rangle \equiv L_{\pm} |\ell, m\rangle [\ell(\ell + 1) - m(m \pm 1)]^{-1/2}$  normierter Eigenvektor von  $L_z$  und  $L^2$  zu den Eigenwerten  $(m \pm 1)\hbar$  bzw.  $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$ .



$$\langle \ell, \ell | L_- L_+ | \ell, \ell \rangle \stackrel{(i)}{=} 0 \Rightarrow L_+ |\ell, \ell\rangle = 0$$

$$\langle \ell, -\ell | L_+ L_- | \ell, -\ell \rangle \stackrel{(i)}{=} 0 \Rightarrow L_- |\ell, -\ell\rangle = 0$$

## Varianzen und Mittelwerte von $L_x$ , $L_y$ , $L_z$ für die Eigenvektoren $|\ell, m\rangle$ :

Es gilt:  $\langle \ell, m | L_z | \ell, m \rangle = \hbar m$ ,  $\Delta L_z^2 = \langle \ell, m | L_z^2 | \ell, m \rangle - \langle \ell, m | L_z | \ell, m \rangle^2 = \hbar^2 m^2 - \hbar^2 m^2 = 0$

BEH: (1)  $\langle \ell, m | L_x | \ell, m \rangle = \langle \ell, m | L_y | \ell, m \rangle = 0$

(2)  $\Delta L_x = \Delta L_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{\ell(\ell+1) - m^2}$

BEW:

(1)  $i\hbar L_x = L_y L_z - L_z L_y \Rightarrow$   
 $i\hbar \langle \ell, m | L_x | \ell, m \rangle = \langle \ell, m | L_y L_z - L_z L_y | \ell, m \rangle = \langle \ell, m | L_y L_z | \ell, m \rangle - \langle \ell, m | L_z L_y | \ell, m \rangle$   
 $= \hbar m \langle \ell, m | L_y | \ell, m \rangle - \hbar m \langle \ell, m | L_y | \ell, m \rangle = 0$

(2)  $\Delta L_x^2 + \Delta L_y^2 \stackrel{(1)}{=} \langle \ell, m | L_x^2 | \ell, m \rangle + \langle \ell, m | L_y^2 | \ell, m \rangle = \langle \ell, m | L_x^2 + L_y^2 | \ell, m \rangle$   
 $= \langle \ell, m | L^2 - L_z^2 | \ell, m \rangle = \langle \ell, m | L^2 | \ell, m \rangle - \langle \ell, m | L_z^2 | \ell, m \rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1) - \hbar^2 m^2$

Aus Symmetriegründen:  $\Delta L_x^2 = \Delta L_y^2 \Rightarrow \Delta L_x^2 = \Delta L_y^2 = \frac{\hbar^2}{2}(\ell(\ell+1) - m^2)$

## Quantisierung des Drehimpuls:

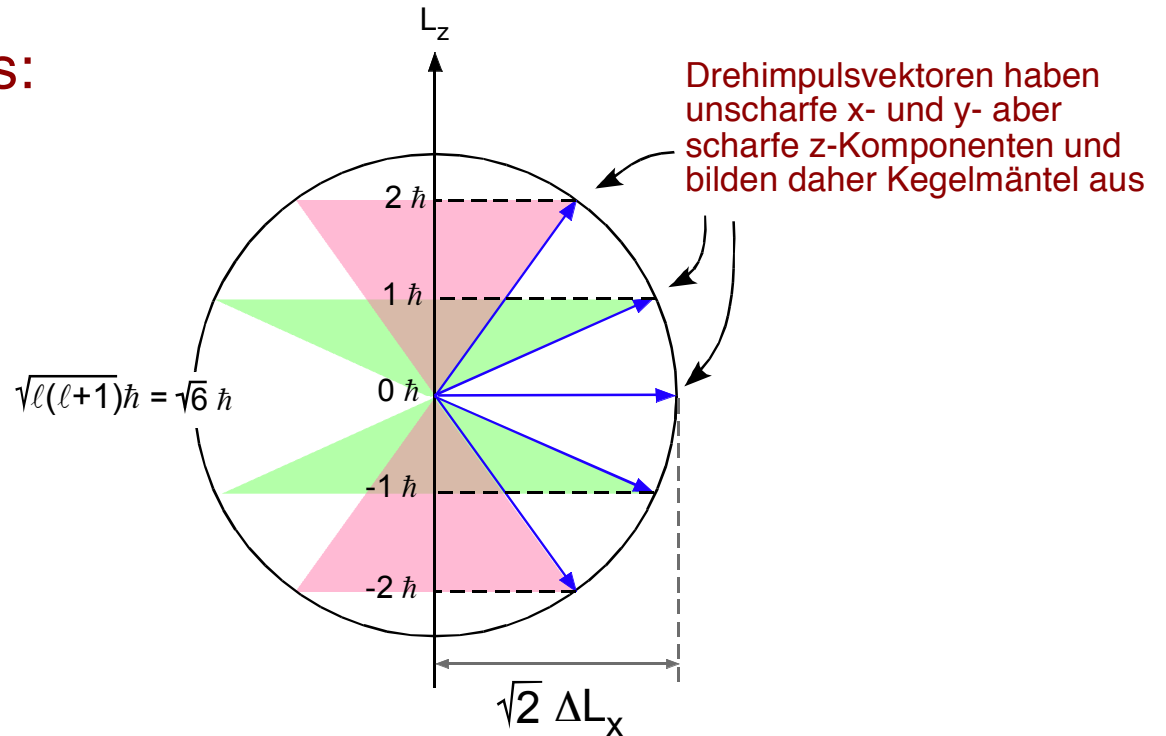
$$\ell = 2 : L^2 |2, m\rangle = \hbar^2 6 |2, m\rangle$$

$$L_z |2, m\rangle = \hbar m |2, m\rangle$$

$$m = -2, -1, 0, 1, 2$$

$$\Delta L_x = \Delta L_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{6 - m^2}$$

$$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$$



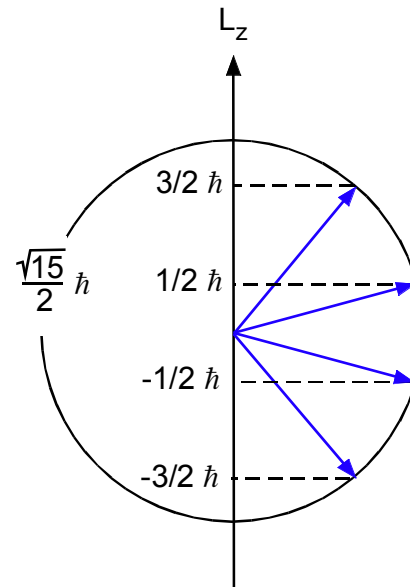
$$\ell = 3/2 : L^2 |3/2, m\rangle = \hbar^2 15/4 |3/2, m\rangle$$

$$L_z |3/2, m\rangle = \hbar m |3/2, m\rangle$$

$$m = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$$

$$\Delta L_x = \Delta L_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{15/4 - m^2}$$

$$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$$



# Der Bahn-Drehimpuls in Polar-Koordinaten:

Kartesische Koordinaten:

$$L_x = Y P_z - Z P_y = \frac{\hbar}{i} \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$L_y = Z P_x - X P_z = \frac{\hbar}{i} \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$L_z = X P_y - Y P_x = \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

Polar-Koordinaten:

$$x = r \sin(\theta) \cos(\phi)$$

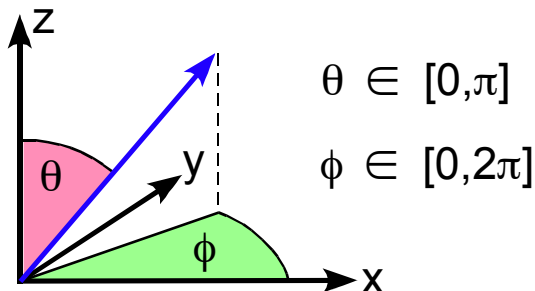
$$y = r \sin(\theta) \sin(\phi)$$

$$z = r \cos(\theta)$$

Volumenelement:

$$d^3r = dx dy dz = r^2 dr d\Omega$$

$$d\Omega = \sin(\theta) d\theta d\phi$$



$L_{x,y,z}$  wirken nur auf Winkelvariablen  $\theta, \phi$ .

$$(i) \quad L_x = Y P_z - Z P_y = i\hbar \left( \frac{\cos(\phi)}{\tan(\theta)} \frac{\partial}{\partial \phi} + \sin(\phi) \frac{\partial}{\partial \theta} \right)$$

$$L_y = Z P_x - X P_z = i\hbar \left( \frac{\sin(\phi)}{\tan(\theta)} \frac{\partial}{\partial \phi} - \cos(\phi) \frac{\partial}{\partial \theta} \right)$$

$$L_z = X P_y - Y P_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\textcircled{Ü} \quad (ii) \quad L^2 = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

$$\textcircled{Ü} \quad (iii) \quad \frac{P^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2m r^2}$$

**BEW (i):**  $L_z = X P_y - Y P_x = \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$  
 $x = r \sin(\theta) \cos(\phi)$   
 $y = r \sin(\theta) \sin(\phi)$  (\*)  
 $z = r \cos(\theta)$

Wende Kettenregel an auf  $f(x,y,z) = f(x(r,\theta,\phi), y(r,\theta,\phi), z(r,\theta,\phi))$  :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \phi} &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \phi} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \phi} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \phi} \quad (*) \\ &= -r \sin(\theta) \sin(\phi) \frac{\partial}{\partial x} + r \sin(\theta) \cos(\phi) \frac{\partial}{\partial y} \\ &= -y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \theta} \quad (*) = r \cos(\theta) \cos(\phi) \frac{\partial}{\partial x} + r \cos(\theta) \sin(\phi) \frac{\partial}{\partial y} - r \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\begin{aligned} \frac{\cos(\phi)}{\tan(\theta)} \frac{\partial}{\partial \phi} + \sin(\phi) \frac{\partial}{\partial \theta} &= 0 \cdot \frac{\partial}{\partial x} + r \cos(\theta) (\sin^2(\phi) + \cos^2(\phi)) \frac{\partial}{\partial y} - r \sin(\theta) \sin(\phi) \frac{\partial}{\partial z} \\ &= z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\sin(\phi)}{\tan(\theta)} \frac{\partial}{\partial \phi} - \cos(\phi) \frac{\partial}{\partial \theta} &= -r \cos(\theta) (\sin^2(\phi) + \cos^2(\phi)) \frac{\partial}{\partial x} + 0 \cdot \frac{\partial}{\partial y} + r \sin(\theta) \cos(\phi) \frac{\partial}{\partial z} \\ &= -z \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial z} \end{aligned}$$

**BEW (ii):** Aus  $\frac{1}{i\hbar}L_x = \frac{\cos(\phi)}{\tan(\theta)}\partial_\phi + \sin(\phi)\partial_\theta$ ,  $\frac{1}{i\hbar}L_y = \frac{\sin(\phi)}{\tan(\theta)}\partial_\phi - \cos(\phi)\partial_\theta$ ,  $\frac{1}{i\hbar}L_z = \partial_\phi$  folgt  $(\partial_a = \frac{\partial}{\partial a})$



$$-\frac{1}{\hbar^2}L_x^2 = \frac{\cos(\phi)}{\tan^2(\theta)}\partial_\phi \cos(\phi)\partial_\phi + \sin^2(\phi)\partial_\theta^2 + \frac{\cos(\phi)}{\tan(\theta)}\partial_\phi \sin(\phi)\partial_\theta + \sin(\phi)\cos(\phi)\partial_\theta \frac{1}{\tan(\theta)}\partial_\phi$$

$$-\frac{1}{\hbar^2}L_y^2 = \frac{\sin(\phi)}{\tan^2(\theta)}\partial_\phi \sin(\phi)\partial_\phi + \cos^2(\phi)\partial_\theta^2 - \frac{\sin(\phi)}{\tan(\theta)}\partial_\phi \cos(\phi)\partial_\theta - \sin(\phi)\cos(\phi)\partial_\theta \frac{1}{\tan(\theta)}\partial_\phi$$

$$-\frac{1}{\hbar^2}L_z^2 = \partial_\phi^2$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{\hbar^2}L_x^2 - \frac{1}{\hbar^2}L_y^2 - \frac{1}{\hbar^2}L_z^2 = \partial_\theta^2 + \frac{1}{\sin^2(\theta)}\partial_\phi^2 + \frac{1}{\tan(\theta)}\partial_\theta$$

**BEW (iii):** Aus der Definition der Drehimpulsoperatoren  $L_x = \frac{\hbar}{i}(y\partial_z - z\partial_y)$ ,  $L_y = \frac{\hbar}{i}(z\partial_x - x\partial_z)$ ,  $L_z = \frac{\hbar}{i}(x\partial_y - y\partial_x)$

folgt  $-\frac{1}{\hbar^2}L^2 = r^2\Delta - x^2\partial_x^2 - y^2\partial_y^2 - z^2\partial_z^2 - 2x\partial_x - 2y\partial_y - 2z\partial_z - 2xy\partial_x\partial_y - 2yz\partial_y\partial_z - 2xz\partial_x\partial_z$

und mit  $r\partial_r = r\frac{\partial x}{\partial r}\partial_x + r\frac{\partial y}{\partial r}\partial_y + r\frac{\partial z}{\partial r}\partial_z \stackrel{(*)}{=} x\partial_x + y\partial_y + z\partial_z$  folgt mit

$$r\partial_r^2 r = r\partial_r + r\partial_r r\partial_r = x^2\partial_x^2 + y^2\partial_y^2 + z^2\partial_z^2 + 2x\partial_x + 2y\partial_y + 2z\partial_z + 2xy\partial_x\partial_y + 2yz\partial_y\partial_z + 2xz\partial_x\partial_z$$

Zusammen ergibt sich  $-\frac{1}{\hbar^2}L^2 = r^2\Delta - r\partial_r^2 r$  und somit  $\Delta = \frac{1}{r}\partial_r^2 r - \frac{1}{\hbar^2 r^2}L^2$

# Eigenzustände des Bahn-Drehimpuls-Operators:



Es gilt:  $L^2 |\ell, m\rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1) |\ell, m\rangle$  mit ganzzahligen Werten:  $\ell = 0, 1, \dots$   
 $L_z |\ell, m\rangle = \hbar m |\ell, m\rangle$  und  $m \in \{-\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell\}$



$$|\ell, m\rangle = Y_\ell^m(\theta, \phi)$$

Kugelflächenfunktionen

$$= \frac{(-1)^m}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!}} e^{im\phi}$$

$$\sin^m(\theta) \frac{d^{\ell+m}}{dz^{\ell+m}} (z^2-1)^\ell \Big|_{z=\cos(\theta)}$$

Assoziierte Legendre-Polynome

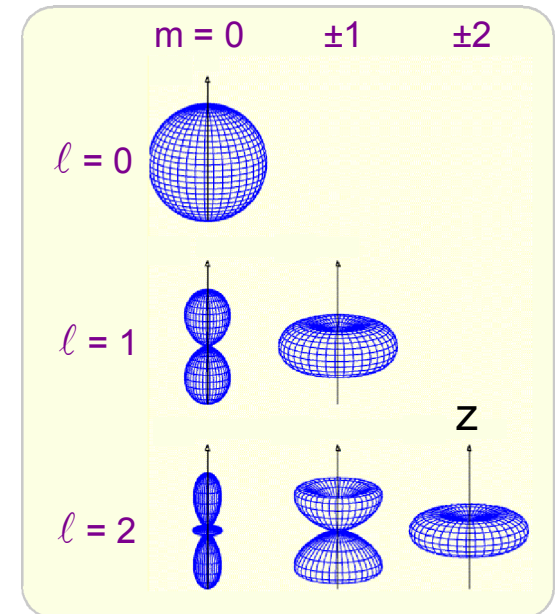
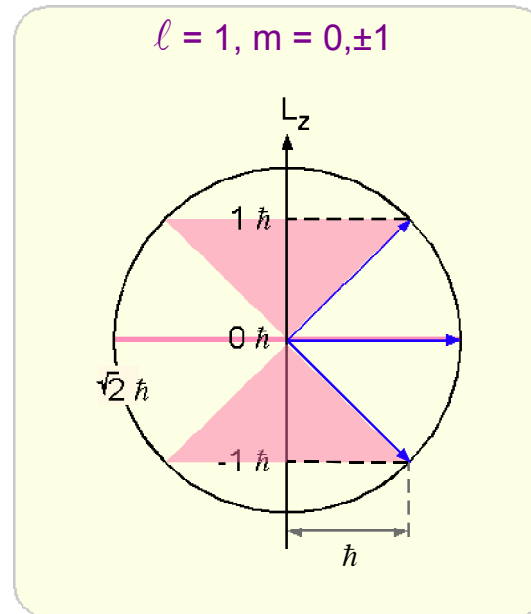
$$Y_0^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\theta)$$

$$Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta) e^{\pm i\phi}$$

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin(\theta) d\theta d\phi |Y_\ell^m(\theta, \phi)|^2 = 1$$

$|Y_\ell^m(\theta, \phi)|^2$  ist rotationssymmetrisch um z-Achse



Polar-Diagramme von  $|Y_\ell^m(\theta, \phi)|^2$



## Schrödinger Gleichung im Zentralpotential:

$$H = \left( \frac{P^2}{2m} + V(\vec{R}) \right) = \left( \frac{P^2}{2m} + V(|\vec{R}|) \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2m r^2} + V(|\vec{R}|)$$

$$\left. \begin{array}{l} V = V(|\vec{R}|) \text{ hängt nur von Radial-Koordinate } r \text{ ab} \\ L_q, q \in \{x, y, z\}, L^2 \text{ hängen nur von Winkelkoordinaten } \theta, \phi \text{ ab} \end{array} \right\} \Rightarrow [L^2, V] = [L_q, V] = 0$$

$\Rightarrow H, L^2, L_z$  kommutieren  $\Rightarrow$  Es gibt eine gemeinsame Eigenbasis

$$H \psi = E \psi, \text{ Ansatz: } \psi(r, \theta, \phi) \equiv R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi), \quad L^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

$$\Rightarrow \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2m r^2} + V(r) \right) R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi) = E_{n\ell} R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

$$\Rightarrow \text{Radial-Gleichung: } \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m r^2} + V(r) \right) R_{n\ell}(r) = E_{n\ell} R_{n\ell}(r)$$

$$R_{n\ell}(r) = u_{n\ell}(r) / r \quad \Rightarrow \quad \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m r^2} + V(r) \right) u_{n\ell}(r) = E_{n\ell} u_{n\ell}(r) \quad (7.3)$$

$\uparrow$   
 Zentrifugal-Potential

# 8. Das Wasserstoff-Atom

## Schrödinger Gleichung im Coulomb-Potential:

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z e^2}{r} \quad \psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{r} u_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

Lösung der Radialgleichung (7.3) im Coulomb-Potential:

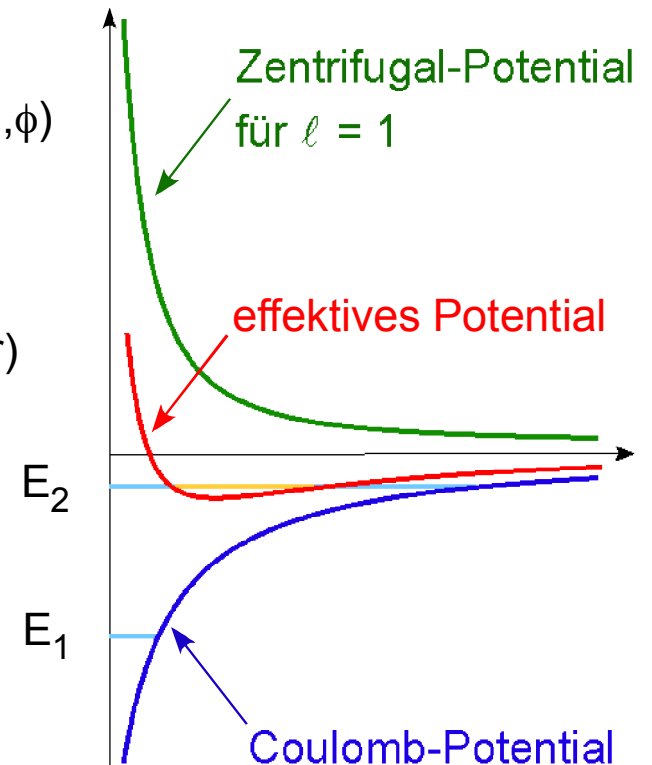
$$\left( \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2}}_{\text{Kinetische Energie}} + \underbrace{\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m r^2}}_{\text{Zentrifugal-Potential}} - \underbrace{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z e^2}{r}}_{\text{Coulomb-Potential}} \right) u_{n\ell}(r) = E_{n\ell} u_{n\ell}(r)$$

Gebundene Zustände:

$$E_{n\ell} = E_n = -\alpha^2 \frac{mc^2}{2} Z^2 \frac{1}{n^2} \quad \alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx 1/137$$

Feinstruktur-Konstante

$$n = 1, 2, \dots \quad \ell = 0, 1, \dots, n-1$$



$$R_{n\ell}(r) = u_{n\ell}(r) / r \equiv N_{n\ell} e^{-\rho_n/2} \rho_n^\ell L_{n+\ell, 2\ell+1}(\rho_n), \quad \rho_n \equiv (2Z r / na_0), \quad a_0 \equiv \text{Bohr-Radius}$$

$$L_{\nu, \mu}(\rho) \equiv (\partial/\partial \rho)^\mu e^\rho (\partial/\partial \rho)^\nu e^{-\rho} \rho^\nu \quad \text{assoziierte Laguerre-Polynome}$$

$$N_{n\ell} \equiv \text{Normierungskonstanten}$$



BEW: Theorievorlesung, siehe z.B. Cohen-Tannoudji, Quantum Mechanics I, Wiley

Warum ist der Grundzustand stabil ? Warum gibt es keine Zustände mit  $E < E_1$  ?

Unterhalb der Energie  $E_1$  ist der Aufwand an kinetischer Energie für die Lokalisierung der Wellenfunktion größer als der Gewinn an potentieller Energie !

Die Lokalisierungsenergie ist eine fundamentale Konsequenz der Wellennatur der Materie

Betrachte normiertes Wellenpaket  $\psi_\xi(r)$  mit Ortsbreite  $\propto \xi$ ,

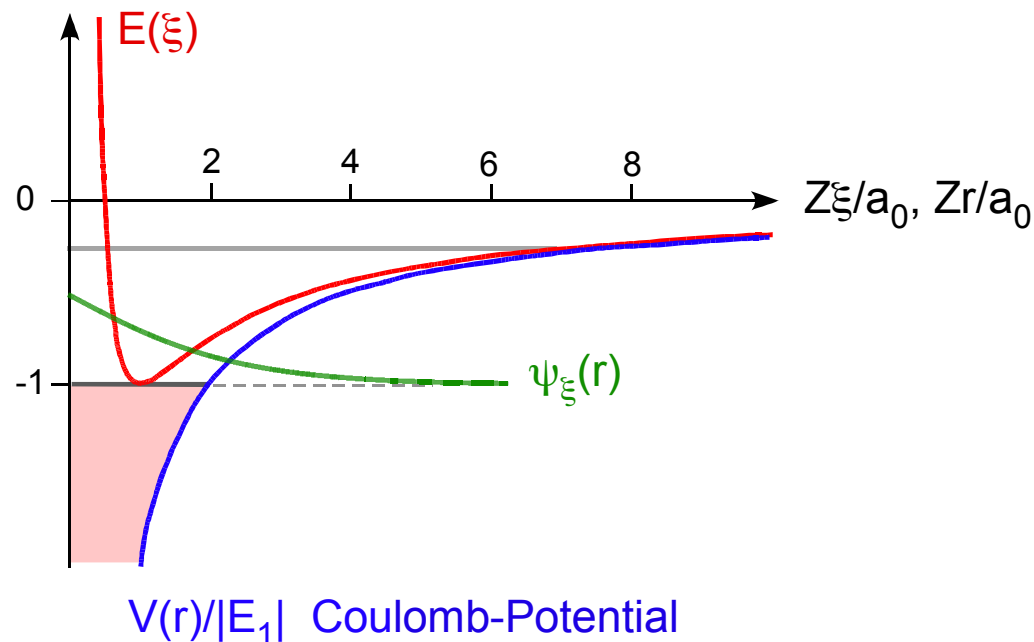
Berechne Erwartungswert der Gesamt-Energie in Abhängigkeit von  $\xi$ :

$$E(\xi) = \langle \psi_\xi | V(R) | \psi_\xi \rangle + \langle \psi_\xi | \frac{p^2}{2m} | \psi_\xi \rangle \geq E_1$$

$$E_1 = -\alpha^2 Z^2 \frac{mc^2}{2}$$

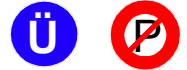
$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}$$

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$$



## Quantitative Betrachtung

verwende:  $\int_0^{\infty} dz z^n e^{-z} = n!$

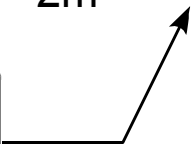


Betrachte normiertes Wellenpaket  $\psi(r) = \pi^{-1/2} \xi^{-3/2} e^{-r/\xi}$  mit der Ortsbreite  $\Delta R^2 = \langle \psi | R^2 | \psi \rangle = 3 \xi^2$

Potentielle Energie:  $V(r) = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{Z}{a_0 r} \Rightarrow \langle \psi | V(R) | \psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{Z}{a_0 \xi}$

Kinetische Energie:  $\langle \psi | L^2 | \psi \rangle = 0 \Rightarrow \langle \psi | \frac{P^2}{2m} | \psi \rangle = \langle \psi | -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r | \psi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m \xi^2}$

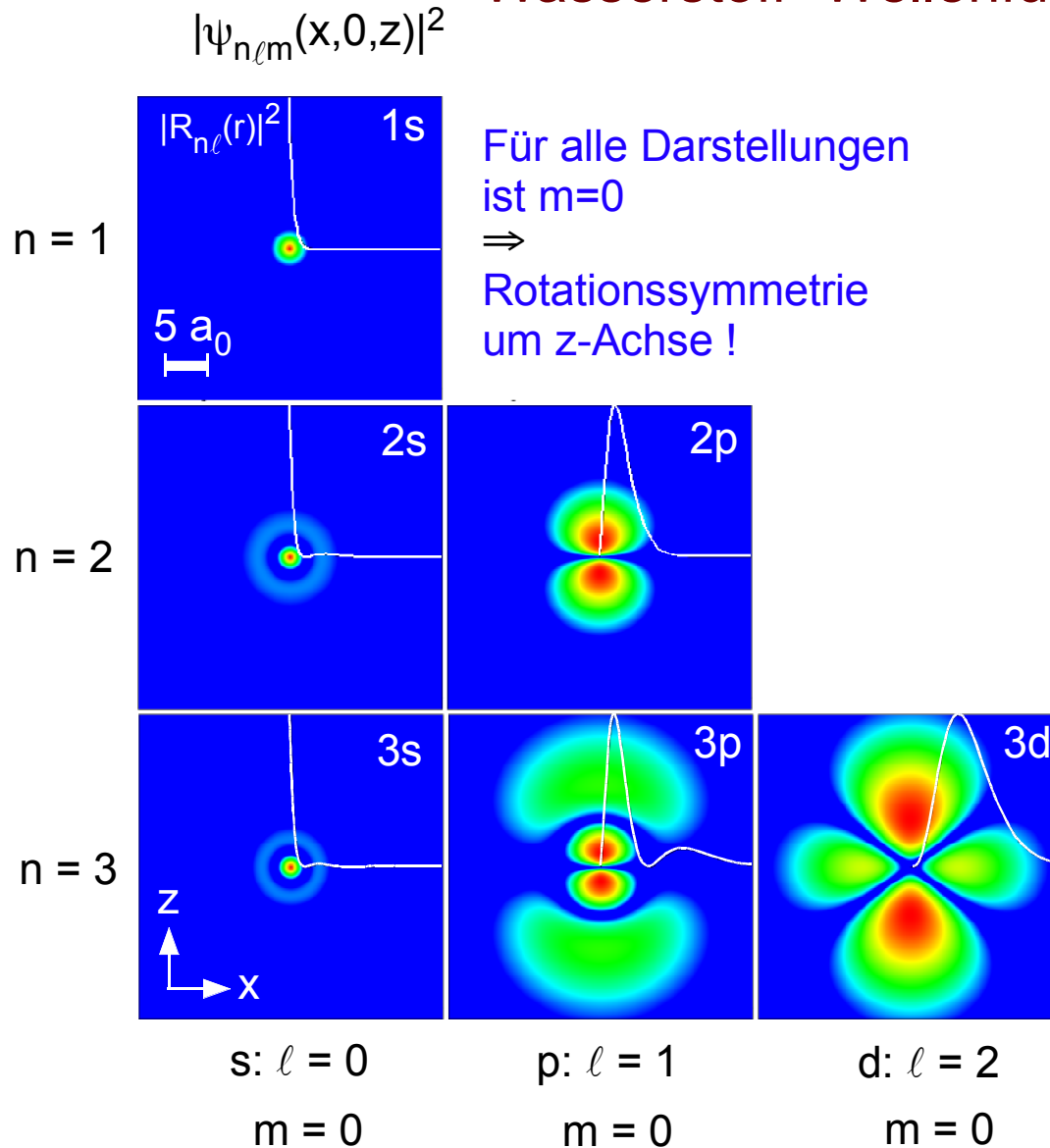
$$\frac{P^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2m r^2}, \quad L^2 | \psi \rangle = 0$$



Gesamt-Energie:  $E(\xi) = \langle \psi | V(R) | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{P^2}{2m} | \psi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{\xi^2} - \frac{2Z}{a_0 \xi} \right)$

Lokales Minimum von  $E(\xi)$ :  $0 = \frac{\partial E}{\partial \xi} \Rightarrow \xi = \frac{a_0}{Z}, \quad E(\xi) = E_1$

# Wasserstoff- Wellenfunktionen $|\psi|^2$

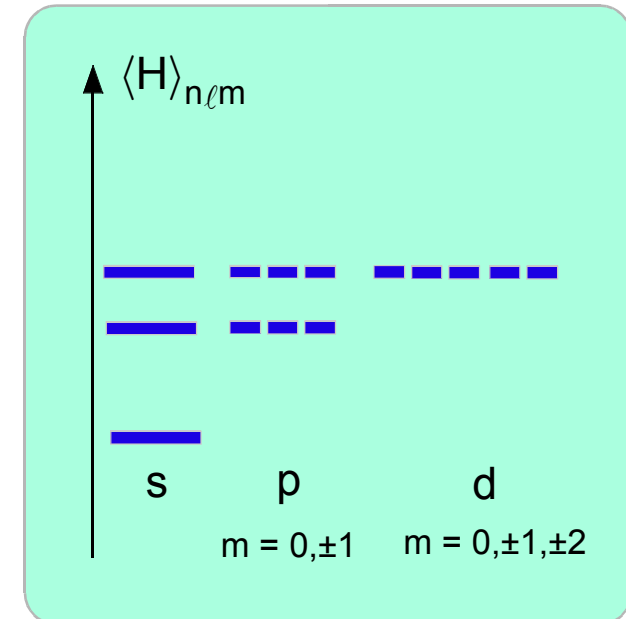


Für alle Darstellungen  
ist  $m=0$   
 $\Rightarrow$   
Rotationssymmetrie  
um z-Achse !

$$\langle H \rangle_{n\ell m} = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{m Z^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

$$\langle L^2 \rangle_{n\ell m} = \hbar^2 \ell(\ell+1)$$

$$\langle L_z \rangle_{n\ell m} = m \hbar$$



Spektroskopie-Konvention:

|          |              |            |                |
|----------|--------------|------------|----------------|
| s: sharp | p: principal | d: diffuse | f: fundamental |
| 0        | 1            | 2          | 3              |

g,h,i,...

4,5,6,...

# Schwerpunkts – und Relativ-Koordinaten



Betrachte zwei Teilchen der Massen  $m_1, m_2$  mit Orts – und Impuls-Operatoren  $R^{(1)}, P^{(1)}, R^{(2)}, P^{(2)}$

Vertauschungsrelationen:  $[R^{(i)}_{\nu}, P^{(j)}_{\mu}] = i\hbar \delta_{\nu\mu} \delta_{ij}$ ,  $\nu, \mu \in \{x,y,z\}$ ,  $i, j \in \{1,2\}$

Neue Koordinaten:  $R^{(s)}$  = Schwerpunkts-Koordinate,  $R^{(r)}$  = Relativ-Koordinate

$$R^{(s)} = \frac{m_1 R^{(1)} + m_2 R^{(2)}}{m_1 + m_2}$$

$$P^{(s)} = P^{(1)} + P^{(2)}$$

$$R^{(r)} = R^{(1)} - R^{(2)}$$

$$P^{(r)} = \frac{m_2 P^{(1)} - m_1 P^{(2)}}{m_1 + m_2}$$

Es gelten folgende Beziehungen:

(i)  $[R^{(i)}_{\nu}, P^{(j)}_{\mu}] = i\hbar \delta_{\nu\mu} \delta_{ij}$ ,  $\nu, \mu \in \{x,y,z\}$ ,  $i, j \in \{r,s\}$

(ii)  $P^{(1)} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} P^{(s)} + P^{(r)}$   $P^{(2)} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} P^{(s)} - P^{(r)}$

(iii)  $\frac{P^{(1)2}}{2m_1} + \frac{P^{(2)2}}{2m_2} = \frac{P^{(s)2}}{2M} + \frac{P^{(r)2}}{2\mu}$   $M \equiv m_1 + m_2$  Gesamt-Masse  
 $\mu \equiv m_1 m_2 / M$  reduzierte Masse

## Zwei-Körper-Problem (Massen $m_1, m_2$ ) :



$$H = \frac{P^{(1)2}}{2m_1} + \frac{P^{(2)2}}{2m_2} + V(R^{(1)} - R^{(2)}) \quad \text{Potential } V \text{ hänge nur von Relativ-Koordinate ab}$$

$$H = H^{(s)} + H^{(r)} \quad H^{(s)} = \frac{P^{(s)2}}{2M} \quad H^{(r)} = \frac{P^{(r)2}}{2\mu} + V(R^{(r)})$$

Es folgt  $[H^{(s)}, H^{(r)}] = 0 \Rightarrow$  Es gibt eine gemeinsame Eigen-Basis  $|\phi_k\rangle$ :

$$H^{(s)} |\phi_k\rangle = E_k^{(s)} |\phi_k\rangle \quad \text{kinetische Energie des Schwerpunkts}$$

$$H^{(r)} |\phi_k\rangle = E_k^{(r)} |\phi_k\rangle \quad \text{Energie der Relativbewegung}$$

$$H |\phi_k\rangle = (E_k^{(s)} + E_k^{(r)}) |\phi_k\rangle$$

**BSP:** Wasserstoff-Atom = Proton + Elektron  $\Rightarrow$  Betrachte Ein-Körper-Problem mit Hamilton-Operator  $H^{(r)}$  und reduzierter Masse  $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ .

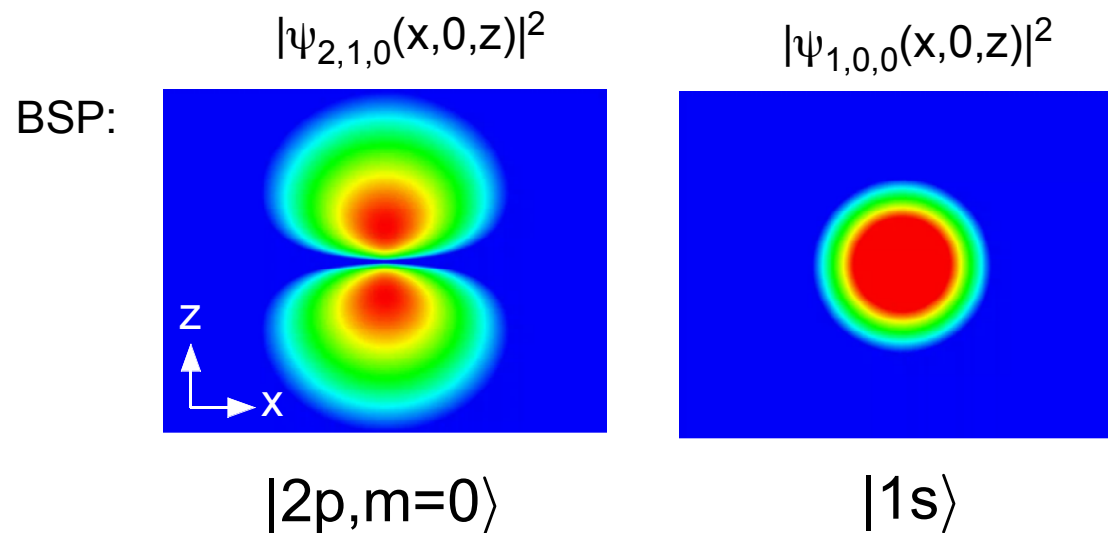


# Strahlungsübergänge:

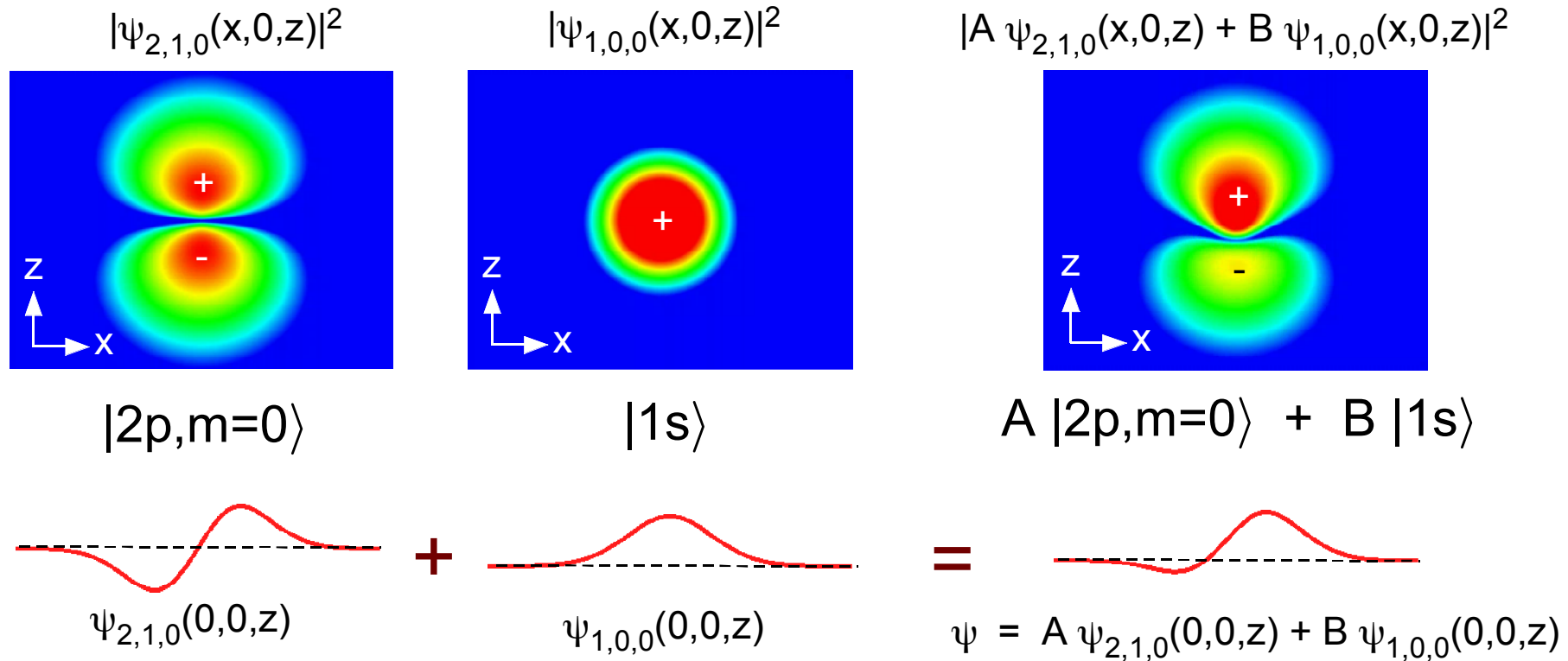
**Bohr:** Atome emittieren oder absorbieren beim Übergang zwischen zwei stationären Zuständen der Energiewerte  $E_m$  bzw.  $E_n$  Photonen der Frequenz  $(E_m - E_n)/\hbar$

**Klassische Physik:** Absorption oder Emission von Dipol-Strahlung erfordert das oszillierende Dipolmoment einer Antenne

Ladungsverteilung stationärer Zustände symmetrisch bzgl. Ursprung → keine Ladungstrennung  
Stationäre Zustände haben kein Dipolmoment



Jedoch Überlagerung zweier stationärer Zustände kann zu Dipolmoment führen



Frage: Welche Überlagerungen  $|\psi\rangle$  zweier stationärer Zustände besitzen ein Dipolmoment, i.e., einen nicht verschwindenden Erwartungswert  $\langle \psi | \vec{D} | \psi \rangle$  des Dipol-Operators  $\vec{D} = e \vec{R}$  ?

$$\langle \psi | \vec{D} | \psi \rangle = e \int |\psi|^2 \vec{r} d^3r \neq 0 ?$$

$\Rightarrow$  Strahlungsauswahlregeln für Dipolübergänge

## Betrachte die Matrixelemente des Dipol-Operators:

Dipol-Operator:  $\vec{D} = e \vec{R}$ ,  $\vec{R}$  = Ortsoperator, Dipolmoment in der klassische Physik  $\vec{D} = e \vec{r}$

$$\langle n, \ell, m | \vec{D} | n', \ell', m' \rangle = e \int r^2 dr d\Omega R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)^* \vec{r} R_{n'\ell'}(r) Y_{\ell' m'}(\theta, \phi)$$

Verwende  $d\Omega = \sin(\theta) d\theta d\phi$  und  $\vec{r} = r \begin{pmatrix} \sin(\theta)\cos(\phi) \\ \sin(\theta)\sin(\phi) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix}$

$$= e \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin(\theta) d\theta d\phi Y_{\ell m}(\theta, \phi)^* Y_{\ell' m'}(\theta, \phi) \begin{pmatrix} \sin(\theta)\cos(\phi) \\ \sin(\theta)\sin(\phi) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix} \int_0^\infty dr r^2 R_{n\ell}(r) r R_{n'\ell'}(r) \quad (8.1)$$

 **Auswahlregeln:**  $\phi$ -Integration:  $\Delta m \equiv m' - m = 0, \pm 1$   $\Leftrightarrow \langle n, \ell, m | \vec{D} | n', \ell', m' \rangle \neq 0$  (8.2)  
 $\theta$ -Integration:  $\Delta \ell \equiv \ell' - \ell = \pm 1$

insbesondere erwartungsgemäß:  $\langle n, \ell, m | \vec{D} | n, \ell, m \rangle = 0$

→ kein permanentes Dipolmoment für Eigenzustände des H-Atoms

Dipolmoment verschwindet für stationäre Zustände:  $\langle n, \ell, m | \vec{D} | n, \ell, m \rangle = 0$ , nicht aber für Überlagerungen  $|\psi\rangle = A |n', \ell', m'\rangle + B |n, \ell, m\rangle$  zwischen Zuständen  $|n', \ell', m'\rangle, |n, \ell, m\rangle$  für welche die Auswahlregeln gelten:  $\Delta \ell = \pm 1, \Delta m = 0, \pm 1$

Betrachte Überlagerung von  $|n', \ell', m'\rangle, |n, \ell, m\rangle$  zur Zeit  $t=0$  :

$$|\psi\rangle = A |n', \ell', m'\rangle + B |n, \ell, m\rangle$$

Für spätere Zeiten  $t > 0$  gemäß Schrödinger Gleichung:

$$|\psi(t)\rangle = A \exp(-iE_{n'} t / \hbar) |n', \ell', m'\rangle + B \exp(-iE_n t / \hbar) |n, \ell, m\rangle$$

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \vec{D} | \psi(t) \rangle &= A^* A \langle n', \ell', m' | \vec{D} | n', \ell', m' \rangle + B^* B \langle n, \ell, m | \vec{D} | n, \ell, m \rangle \\ &+ A^* B \langle n', \ell', m' | \vec{D} | n, \ell, m \rangle \exp(i(E_{n'} - E_n) t / \hbar) \\ &+ A B^* \langle n, \ell, m | \vec{D} | n', \ell', m' \rangle \exp(i(E_n - E_{n'}) t / \hbar) \end{aligned} \quad (8.3)$$

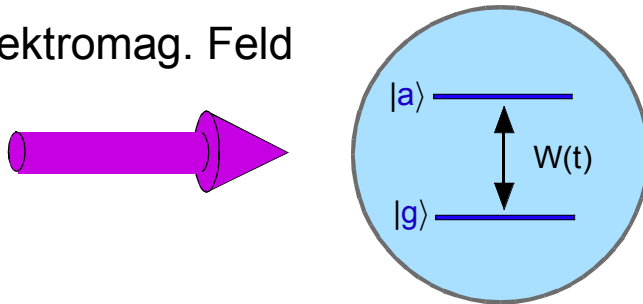
$$\Rightarrow \langle \psi(t) | \vec{D} | \psi(t) \rangle \text{ oszilliert mit der Übergangsfrequenz } (E_{n'} - E_n) / \hbar$$

$$\langle \psi(t) | \vec{D} | \psi(t) \rangle \neq 0 \text{ erfordert } A \neq 0 \text{ und } B \neq 0$$

Der Zustand  $|\psi(t)\rangle$  kann Photonen der Frequenz  $\omega = (E_{n'} - E_n) / \hbar$  abstrahlen bzw. aufnehmen

# Strahlungsübergänge: $|a\rangle, |g\rangle$ Eigenzustände des atomaren Hamilton-Operators $H_0$

elektromag. Feld



Gesamt Hamilton-Operator:  $H = H_0 + W(t)$

$$W = - \vec{D} \vec{E}(t)$$

Operator des elektrischen Dipolmoments:

$$\vec{D} = e \vec{R}, \quad \vec{R} = \text{Ortsoperator}$$

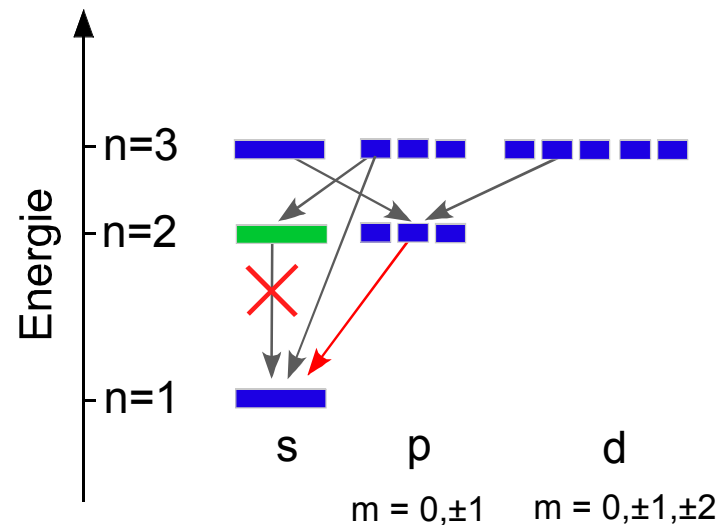
- Fall 1: Atom im externen elektromag. Feld (z.B. in einem Laserstrahl)  
stimulierte Absorption bzw. Emission: periodische Dynamik (Rabi-Oszillation) der Besetzungen der Zustände  $|g\rangle, |a\rangle$

Atom für  $t = 0$  in  $|g\rangle$ , Dipolmoment  $\langle g|D|g\rangle = 0 \rightarrow$  externes Feld  $E(t)$  führt zu einer kleinen Beimischung von  $|a\rangle$   
 $\rightarrow$  elektrisches Dipolmoment bildet sich aus  $\rightarrow$  Energieaufnahme aus dem Feld, Beimischung von  $|a\rangle$  wächst  
 $\rightarrow$  Atom geht über in den Zustand  $|a\rangle$ , Dipolmoment  $\langle a|D|a\rangle = 0$   
 $\rightarrow$  externes Feld führt zu einer Beimischung von  $|g\rangle \rightarrow$  elektrisches Dipolmoment bildet sich aus  
 $\rightarrow$  Energieabgabe an das Feld  $\rightarrow$  Atom geht über in den Zustand  $|g\rangle \rightarrow$  und so weiter ... Rabi-Oszillation

- Fall 2: Atom im elektromag. Feld des Vakuums:  $\langle E \rangle = 0, \langle E^2 \rangle \neq 0$   
spontane Emission falls Atom im angeregten Zustand  $|a\rangle$

Atom für  $t = 0$  in  $|a\rangle \rightarrow$  Vakuumfluktuationen führen zu einer winzigen Beimischung von  $|g\rangle \rightarrow$  elektr. Dipolmoment bildet sich aus  $\rightarrow$  Emission eines Photons  $\rightarrow$  Atom geht über in den Zustand  $|g\rangle$ . Atom bleibt in  $|g\rangle$ , da Energieaufnahme aus dem Vakuumfeld nicht möglich, denn emittiertes Photon kehrt nicht mehr zum Atom zurück.

## Dipolübergänge im Wasserstoff-Atom:



Das  $2s$ -Niveau kann aufgrund der Auswahlregeln nicht über einen Dipolübergang zerfallen, obwohl es nicht den Grundzustand darstellt. Solche Niveaus nennt man metastabil.

Die natürliche Lebensdauer des  $2p$ -Niveaus beträgt 1.06 ns, die des  $2s$ -Niveaus etwa 0.14 sec.



## BSP: Überlagerung von $[2P, m \in \{0, \pm 1\}]$ mit $[1S]$

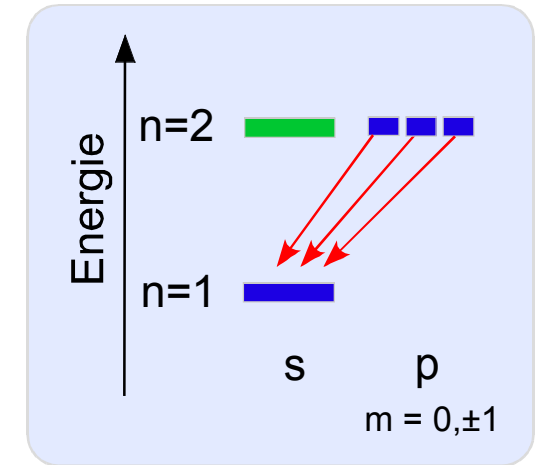
Betrachte Überlagerung der Zustände  $|2, 1, m\rangle$  und  $|1, 0, 0\rangle$ ,  $m \in \{0, \pm 1\}$ :

zur Zeit  $t=0$  :  $|\psi_m\rangle \equiv A |2, 1, m\rangle + B |1, 0, 0\rangle$ , wähle oBdA:  $A, B$  reell

Für spätere Zeiten  $t > 0$  gilt gemäß Schrödinger-Gleichung :

$$|\psi_m(t)\rangle = A \exp(-iE_2 t / \hbar) |2, 1, m\rangle + B \exp(-iE_1 t / \hbar) |1, 0, 0\rangle$$

$$\text{Verwende: } \langle 2, 1, m | \vec{D} | 2, 1, m \rangle = \langle 1, 0, 0 | \vec{D} | 1, 0, 0 \rangle = 0$$



$$\Rightarrow \langle \psi_m(t) | \vec{D} | \psi_m(t) \rangle \stackrel{(8.3)}{=} A B \langle 2, 1, m | \vec{D} | 1, 0, 0 \rangle \exp(i(E_2 - E_1) t / \hbar) + \text{c.c.} \quad (8.4)$$

$$\text{Berechnung der Matrixelemente} \quad \langle 2, 1, m | \vec{D} | 1, 0, 0 \rangle \stackrel{(8.1)}{=}$$

$$= e \int_0^\pi \int_0^{2\pi} d\theta d\phi \sin(\theta) Y_{1,m}(\theta, \phi)^* \underbrace{Y_{0,0}(\theta, \phi)}_{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}} \begin{pmatrix} \sin(\theta)\cos(\phi) \\ \sin(\theta)\sin(\phi) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix} \underbrace{\int_0^\infty dr r^2 R_{2,1}(r) r R_{1,0}(r)}_{I_R}$$



$$\langle 2,1,m | \vec{D} | 1,0,0 \rangle = \frac{e}{\sqrt{4\pi}} I_R \int_0^\pi \int_0^{2\pi} d\theta d\phi \sin(\theta) Y_{1,m}(\theta,\phi)^* \begin{pmatrix} \sin(\theta)\cos(\phi) \\ \sin(\theta)\sin(\phi) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix} \quad (8.5)$$

Einsetzen in (8.5)

$$m = 0: Y_{1,0}(\theta,\phi) \equiv \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\theta)$$

$$m = \pm 1: Y_{1,\pm 1}(\theta,\phi) \equiv \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta) e^{\pm i\phi}$$

$\Rightarrow$

$$\langle 2,1,0 | \vec{D} | 1,0,0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} e I_R \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (8.6)$$

$$\langle 2,1,\pm 1 | \vec{D} | 1,0,0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} e I_R \begin{pmatrix} \pm 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} \quad (8.7)$$

Erwartungswert des Dipolmoments für  $|\psi_m(t)\rangle$ ,  $m \in \{0, \pm 1\}$ :

$$m = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle \psi_0(t) | \vec{D} | \psi_0(t) \rangle \stackrel{(8.4,8.6)}{=} \frac{1}{\sqrt{3}} e I_R A B \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \cos(\omega t) \end{pmatrix} \quad (8.8)$$

Dipolmoment schwingt parallel zur z-Achse

$$m = \pm 1 \quad \Rightarrow \quad \langle \psi_{\pm 1}(t) | \vec{D} | \psi_{\pm 1}(t) \rangle \stackrel{(8.4,8.7)}{=} \frac{1}{\sqrt{6}} e I_R A B \begin{pmatrix} \pm \cos(\omega t) \\ -\sin(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (8.9)$$

Dipolmoment dreht sich in der xy-Ebene

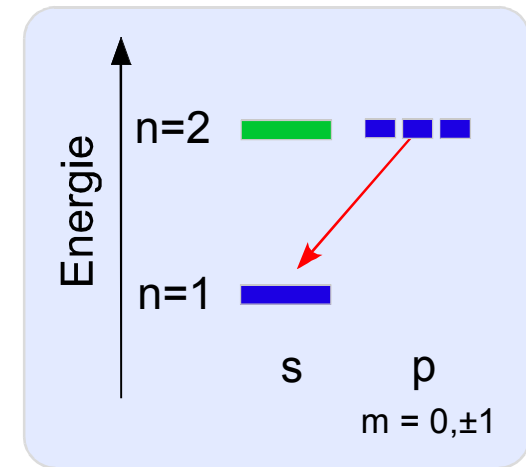




## Überlagerung von $[2p, m=0]$ mit $[1s]$ :

$$|\psi_0(t)\rangle = A \exp(-iE_2 t / \hbar) |2,1,0\rangle + B \exp(-iE_1 t / \hbar) |1,0,0\rangle$$

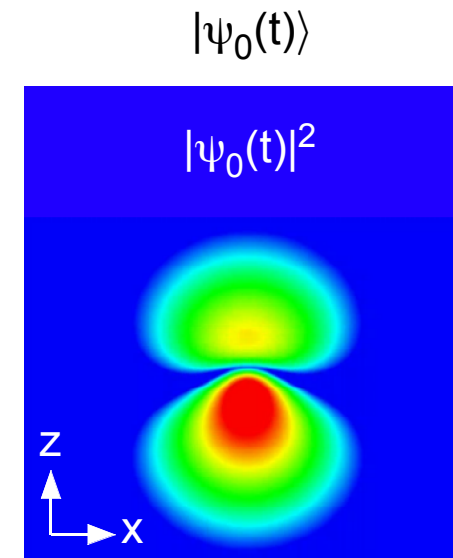
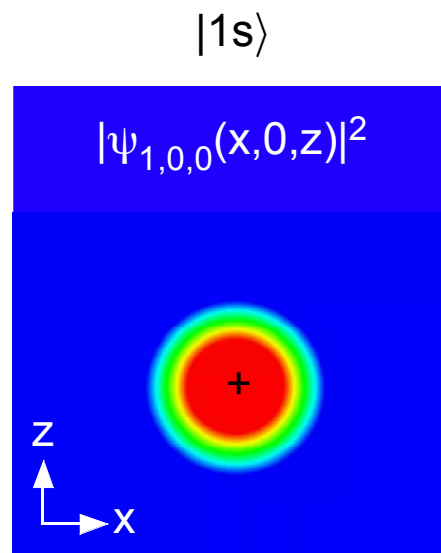
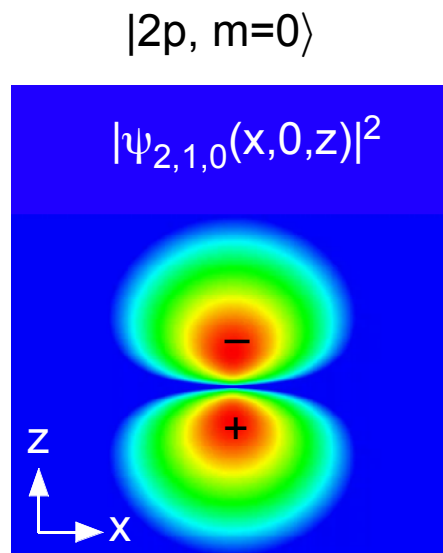
$$\langle \psi_0(t) | \vec{D} | \psi_0(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} e I_R A B \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \cos(\omega t) \end{pmatrix}$$



Dipolmoment oszilliert linear polarisiert längs z-Achse !

Emission von in rz-Ebene linear polarisiertem Licht ( $r$  = Beobachtungsrichtung)

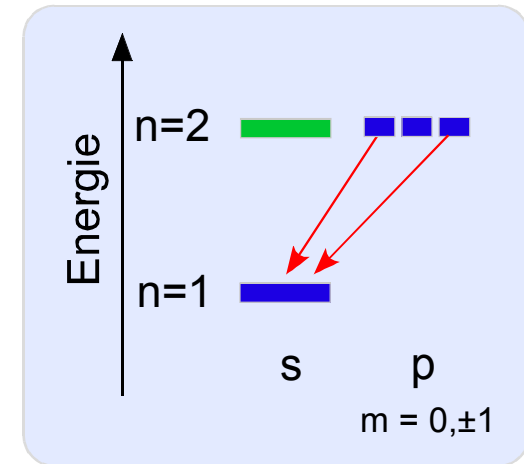
Illustration der xz-Ebene:



# Überlagerung von $[2p, m=\pm 1]$ mit $[1s]$ :

$$|\psi_{\pm 1}(t)\rangle = A \exp(-iE_2 t / \hbar) |2,1,\pm 1\rangle + B \exp(-iE_1 t / \hbar) |1,0,0\rangle$$

$$\langle \psi_{\pm 1}(t) | \vec{D} | \psi_{\pm 1}(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} e I_R A B \begin{pmatrix} \pm \cos(\omega t) \\ -\sin(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix}$$



Dipolmoment dreht sich im oder entgegen dem Uhrzeigersinn in der xy-Ebene !  
Polarisationstyp des emittierten Lichts hängt von Beobachtungsrichtung ab

Illustration der xy-Ebene:

